

# wwPDB NMR Structure Validation Summary Report (i)

#### Apr 2, 2020 – 11:16 AM CDT

PDB ID : 2K2E

Title: Solution NMR structure of Bordetella pertussis protein BP2786, a Mth938-like

domain. Northeast Structural Genomics Consortium target BeR31

Authors: Cort, J.R.; Ho, C.K.; Nwosu, C.; Maglaqui, M.; Xiao, R.; Liu, J.; Baran,

M.C.; Swapna, G.; Acton, T.B.; Rost, B.; Montelione, G.T.; Kennedy, M.A.;

Northeast Structural Genomics Consortium (NESG)

Deposited on : 2008-04-01

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

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org
A user guide is available at
https://www.wwpdb.org/validation/2017/NMRValidationReportHelp
with specific help available everywhere you see the (i) symbol.

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

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)

NmrClust : Kelley et al. (1996)

MolProbity: 4.02b-467

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

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

PANAV : Wang et al. (2010)

 ${\bf ShiftChecker} \quad : \quad 2.6. dev1$ 

BMRB Restraints Analalysis : v1.2

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

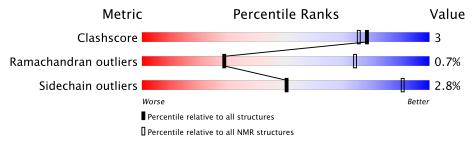
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.6.dev1

# 1 Overall quality at a glance (i)

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

The overall completeness of chemical shifts assignment is 60%.

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	158	70%	•	29%



# 2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 20 models. Model 11 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: closest to the average.

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

Well-defined (core) protein residues						
Well-defined core   Residue range (total)   Backbone RMSD (Å)   Medoid mode						
1	A:11-A:63,	A:88-A:146	0.55	11		
	(112)					

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. No single-model clusters were found.

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



# 3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2367 atoms, of which 1179 are hydrogens and 0 are deuteriums.

• Molecule 1 is a protein called Uncharacterized protein BP2786.

Mol	Chain	Residues	${f Atoms}$			Trace			
1	٨	158	Total	С	Н	N	О	S	0
1	А	198	2367	744	1179	219	221	4	U

There are 8 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	151	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7VV99
A	152	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7VV99
A	153	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7VV99
A	154	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7VV99
A	155	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7VV99
A	156	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7VV99
A	157	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7VV99
A	158	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7VV99

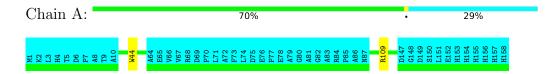


# 4 Residue-property plots (i)

### 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.

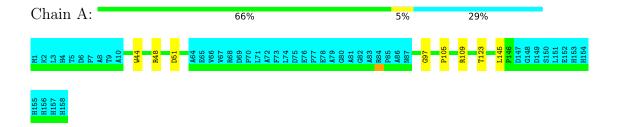
• Molecule 1: Uncharacterized protein BP2786



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

The representative model is number 11. Colouring as in section 4.1 above.

• Molecule 1: Uncharacterized protein BP2786





#### 5 Refinement protocol and experimental data overview (i)



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

Of the 20 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: all calculated structures submitted.

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

Software name	Classification	Version
AutoStructure	refinement	
AutoStructure	structure solution	
PSVS	refinement	
CNS	refinement	
CNS	structure solution	
X-PLOR NIH	refinement	
X-PLOR NIH	structure solution	

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)	2k2e_nmr.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1509
Number of shifts mapped to atoms	971
Number of unparsed shifts	194
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	344
Assignment completeness (well-defined parts)	60%

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	837	856	854	5±2
All	All	16740	17120	17080	104

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 3.

5 of 67 unique clashes are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom 1	Atom-1 Atom-2		Distance(Å)	Models	
Atom-1			Distance(A)	Worst	Total
1:A:48:ARG:HB2	1:A:51:ASP:HB2	0.84	1.48	11	1
1:A:21:TYR:HE1	1:A:23:GLU:HB2	0.73	1.43	16	1
1:A:100:GLN:HG3	1:A:121:MET:HA	0.67	1.64	2	2
1:A:91:VAL:HG11	1:A:133:LEU:HD21	0.64	1.68	6	1
1:A:105:PRO:O	1:A:109:ARG:HB2	0.62	1.94	6	3

# 6.3 Torsion angles (i)

#### 6.3.1 Protein backbone (i)

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



Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Perce	entiles
1	A	112/158 (71%)	104±2 (92±2%)	8±2 (7±2%)	1±1 (1±1%)	28	74
All	All	2240/3160 (71%)	2071 (92%)	153 (7%)	16 (1%)	28	74

5 of 6 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	25	ASN	6
1	A	146	PRO	5
1	A	18	GLY	2
1	A	98	ARG	1
1	A	26	GLN	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	85/120 (71%)	83±1 (97±2%)	2±1 (3±2%)	50 91
All	All	1700/2400 (71%)	1653 (97%)	47 (3%)	50 91

5 of 20 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	44	TRP	11
1	A	15	THR	6
1	A	23	GLU	5
1	A	96	THR	4
1	A	12	ASN	2

## 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 60% for the well-defined parts and 52% for the entire structure.

#### 7.1 Chemical shift list 1

File name: 2k2e nmr.cif

Chemical shift list name: nef\_chemical\_shift\_list\_2k2e.mr

#### 7.1.1 Bookkeeping (i)

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

Total number of shifts	1509
Number of shifts mapped to atoms	971
Number of unparsed shifts	194
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	344
Number of shift outliers (ShiftChecker)	0

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

• Chemical shift has been reported more than once. First 5 (of 194) occurrences are reported below.

Shift ID	Chain	Res	Type	Atom		Shift Dat	a
	Chain	nes	Type	Atom	Value	Uncertainty	Ambiguity
2	A	1	MET	HE%	2.070	0.020	1
3	A	1	MET	HE%	2.070	0.020	1
4	A	1	MET	HE%	2.070	0.020	1
5	A	1	MET	HE%	2.070	0.020	1
6	A	1	MET	HE%	2.070	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 344) occurrences are reported below.

Chain	Pos	Type	Atom		Shift Dat	a
Chain	rtes	Type	Atom	Value	Shift Dat Uncertainty	Ambiguity
A	47	GLN	HGx	2.28	0.02	2
A	139	ARG	HBx	1.91	0.02	2



Continued from previous page...

Chain	Pag	Type	Atom		Shift Dat	
Chain	nes	Туре	Atom	Value	Uncertainty	Ambiguity
A	54	ALA	HB%	1.53	0.02	1
A	144	LEU	HD1%	0.76	0.02	1
A	43	SER	HBy	3.84	0.02	2

#### 7.1.2 Chemical shift referencing (i)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction $\pm$ precision, $ppm$	Suggested action
$^{13}\mathrm{C}_{\alpha}$	145	$-0.15 \pm 0.13$	None needed ( $< 0.5 \text{ ppm}$ )
$^{13}C_{\beta}$	132	$0.40 \pm 0.09$	None needed ( $< 0.5 \text{ ppm}$ )
<sup>13</sup> C′	130	$0.36 \pm 0.13$	None needed (< 0.5 ppm)
$^{15}N$	130	$-0.04 \pm 0.35$	None needed ( $< 0.5 \text{ ppm}$ )

#### 7.1.3 Completeness of resonance assignments (i)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 60%, i.e. 786 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1321. 24 out of 26 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	$^{1}\mathrm{H}$	$^{13}\mathbf{C}$	$^{15}{ m N}$
Backbone	520/544 (96%)	$204/216 \ (94\%)$	$214/224 \ (96\%)$	102/104 (98%)
Sidechain	$236/707 \ (33\%)$	33/410 (8%)	$202/263 \ (77\%)$	1/34 (3%)
Aromatic	30/70 (43%)	16/36 (44%)	13/29 (45%)	1/5 (20%)
Overall	786/1321 (60%)	$253/662 \ (38\%)$	429/516 (83%)	104/143 (73%)

# 7.1.4 Statistically unusual chemical shifts 1

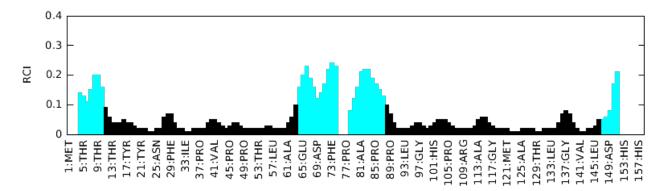
There are no statistically unusual chemical shifts.

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

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



Random coil index (RCI) for chain A:





# 8 Distance restraints analysis

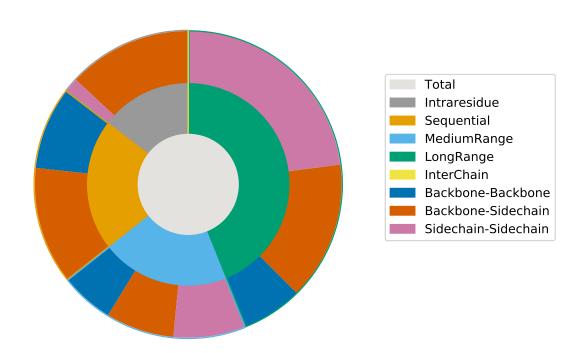
#### 8.1 Distance restraints summary

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

Dogtrointa turo	$B-B^1(H^4)$	$\mathbf{B} ext{-}\mathbf{S}^2(\mathbf{H}^4)$	S-S <sup>3</sup> (H <sup>4</sup> )	Total		
Restraints type	<b>D-D</b> ( <b>I</b> 1 )	D-8-(II-)	S-S*( <b>I</b> 1-)	$Total(H^4)$	$ m RR^{5}$	$\%^6$
Intraresidue ( $ i-j =0$ )	0(0)	147(0)	17(0)	164(0)	1.1	14.6
Sequential ( i-j =1)	98(0)	138(0)	1(0)	237(0)	1.6	21.1
Medium range ( $ i-j >1$ and $ i-j <5$ )	63(30)	81(0)	86(0)	230(30)	1.5	20.4
Long range ( i-j ≥5)	72(36)	164(0)	258(0)	494(36)	3.3	43.9
Inter chain	0(0)	0(0)	0(0)	0(0)	0.0	0.0
Total	233(66)	530(0)	362(0)	1125(66)	7.5	100.0

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

#### 8.1.1 Pie chart: Distance restraints summary





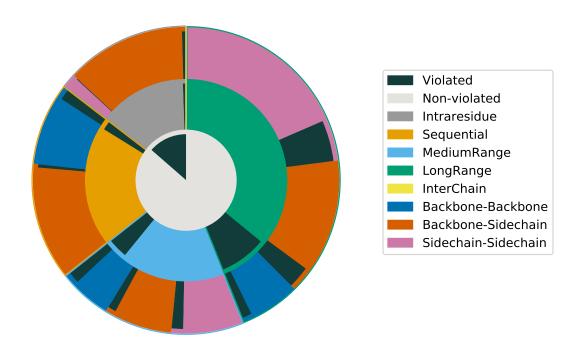
# 8.2 Distance violations summary

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

Doctroints true	$B-B^{1}(\%^{4})$	$B-S^2(\%^4)$	$S-S^3(\%^4)$	Total		
Restraints type	<b>D-D</b> (%)	<b>D-3</b> (%)	S-S'(%)	$Total(\%^4)$	$RR^5$	$\%^6$
Intraresidue ( $ i-j =0$ )	0(0.0)	5(3.4)	1(5.9)	6(3.7)	0.0	3.9
Sequential ( i-j =1)	14(14.3)	4(2.9)	0(0.0)	18(7.6)	0.1	11.8
Medium range ( $ i-j >1$ and $ i-j <5$ )	15(23.8)	10(12.3)	14(16.3)	39(17.0)	0.3	25.5
Long range ( i-j ≥5)	13(18.1)	27(16.5)	50(19.4)	90(18.2)	0.6	58.8
Inter chain	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Total	42(18.0)	46(8.7)	65(18.0)	153(13.6)	1.0	100.0

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

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





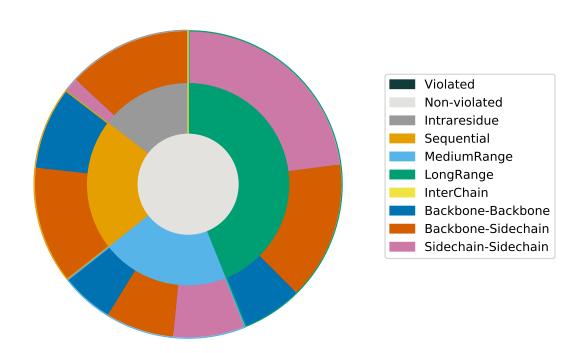
# 8.3 Consistent distance violations summary

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

Doctroints type	$B-B^{1}(\%^{4})$	$B-S^2(\%^4)$	$S-S^3(\%^4)$	Total		
Restraints type	<b>D-D</b> (/0 )	<b>D-</b> S (70)	3-3 (%)	$Total(\%^4)$	$RR^5$	$\%^6$
Intraresidue ( $ i-j =0$ )	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Sequential ( i-j =1)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Medium range ( $ i-j >1$ and $ i-j <5$ )	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Long range ( i-j ≥5)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Inter chain	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Total	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0

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

#### 8.3.1 Pie-chart: Consistent distance violations





#### 8.4 Residual distance violations

Violation are counted in different bin sizes and listed below

Range (Å)	Avg. No. of violated restraints per model	Max violation (Å)
0-0.2	22.4	0.13
0.2-0.5	None	None
0.5-1.0	None	None
1.0-2.0	None	None
2.0-5.0	None	None
5.0<	None	None

#### 8.5 Distance violations in ensemble

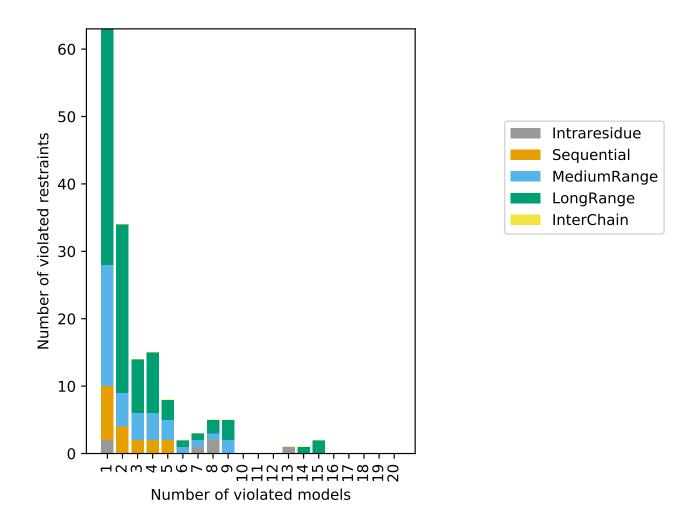
The restraints are grouped based on the number of violated models and listed here.

I		f violat	ted re	strair	$\operatorname{nts}$	No. of violated models
$IR^1$	$SQ^2$	$MR^3$	$LR^4$	$IC^5$	Total	No. of violated models
2	8	18	35	0	63	1
0	4	5	25	0	34	2
0	2	4	8	0	14	3
0	2	4	9	0	15	4
0	2	3	3	0	8	5
0	0	1	1	0	2	6
1	0	1	1	0	3	7
2	0	1	2	0	5	8
0	0	2	3	0	5	9
0	0	0	0	0	0	10
0	0	0	0	0	0	11
0	0	0	0	0	0	12
1	0	0	0	0	1	13
0	0	0	1	0	1	14
0	0	0	2	0	2	15
0	0	0	0	0	0	16
0	0	0	0	0	0	17
0	0	0	0	0	0	18
0	0	0	0	0	0	19
0	0	0	0	0	0	20

 $<sup>^1 \</sup>rm intraresidue$  restraints,  $^2 \rm sequential$  restraints,  $^3 \rm medium$  range restraints,  $^4 \rm long$  range restraints,  $^5 \rm inter$  chain restraints



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



158 intraresidue restraints, 219 sequential restraints, 191 medium range restraints,404 long range restraints and 0 inter chain restraints are not violated. In total, 972 restraints are 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		No. of violations					Mean (Å)	Max (Å)
Model 1D	$IR^1$	$SQ^2$	$ m MR^3$	$LR^4$	$IC^5$	Total	Mean (A)	Max (A)
1	2	1	5	11	0	19	0.03	0.1
2	1	4	5	16	0	26	0.02	0.08
3	3	2	7	6	0	18	0.03	0.09
4	0	3	2	9	0	14	0.02	0.03
5	2	4	10	14	0	30	0.03	0.08



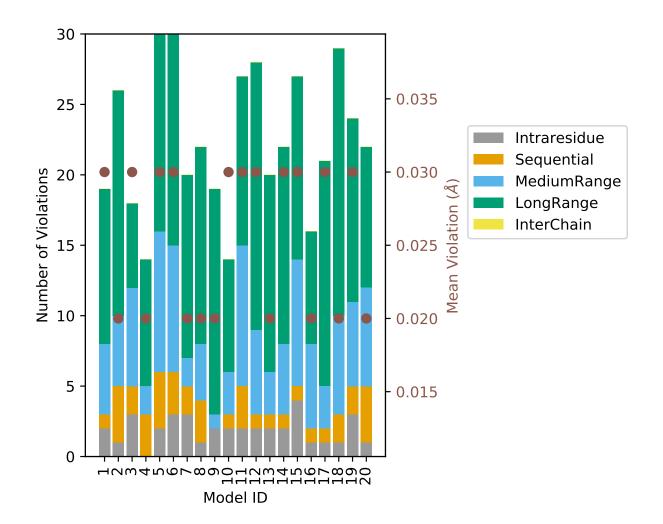
Continued from previous page...

Model ID	No. of violations						Mean (Å) Max (Å)		
Model 1D	$IR^1$	$SQ^2$	$MR^3$	$LR^4$	$IC^5$	Total	Mean (A)	Max (A)	
6	3	3	9	15	0	30	0.03	0.09	
7	3	2	2	13	0	20	0.02	0.08	
8	1	3	4	14	0	22	0.02	0.07	
9	2	0	1	16	0	19	0.02	0.08	
10	2	1	3	8	0	14	0.03	0.08	
11	2	3	10	12	0	27	0.03	0.08	
12	2	1	6	19	0	28	0.03	0.1	
13	2	1	3	14	0	20	0.02	0.1	
14	2	1	5	14	0	22	0.03	0.13	
15	4	1	9	13	0	27	0.03	0.08	
16	1	1	6	8	0	16	0.02	0.06	
17	1	1	3	16	0	21	0.03	0.07	
18	1	2	7	19	0	29	0.02	0.06	
19	3	2	6	13	0	24	0.03	0.11	
20	1	4	7	10	0	22	0.02	0.05	

 $<sup>^1 \</sup>rm intraresidue$  restraints,  $^2 \rm iequential$  restraints,  $^3 \rm iedium$  range restraints,  $^4 \rm long$  range restraints,  $^5 \rm inter$  chain restraints



## 8.6.1 Bar graph: Violations in each model

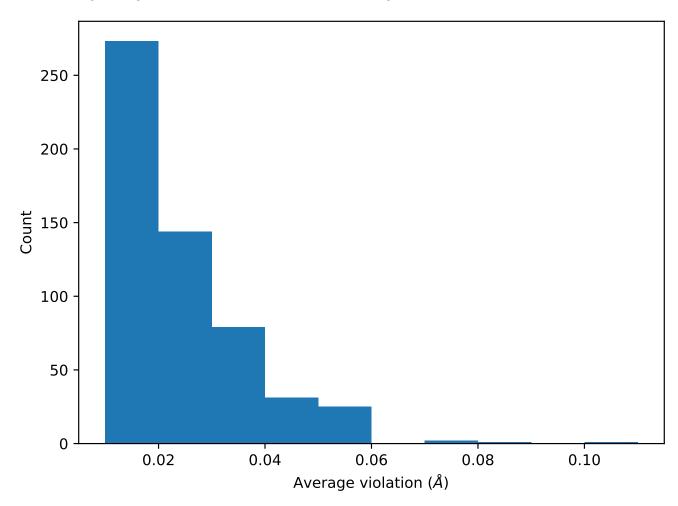




#### 8.7 Most violated distance restraints

## 8.7.1 Histogram : Distribution of mean distance violations

The following histogram shows the distribution of average violations 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)
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG21	15	0.02	0.05
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG22	15	0.02	0.05
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG23	15	0.02	0.05
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG21	15	0.02	0.05
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG22	15	0.02	0.05
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG23	15	0.02	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG21	15	0.02	0.05
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG22	15	0.02	0.05
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG23	15	0.02	0.05
(1,340)	1:A:33:ILE:HA	1:A:42:ALA:H	15	0.02	0.06
(1,1117)	1:A:139:ARG:O	1:A:91:VAL:H	14	0.04	0.08
(1,905)	1:A:19:ASP:H	1:A:19:ASP:HB3	13	0.07	0.1
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD21	9	0.04	0.08
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD22	9	0.04	0.08
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD23	9	0.04	0.08
(1,686)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:51:ASP:HB2	9	0.03	0.04
(1,686)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:51:ASP:HB2	9	0.03	0.04
(1,686)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:51:ASP:HB2	9	0.03	0.04
(1,575)	1:A:16:ALA:HB1	1:A:23:GLU:HB2	9	0.02	0.03
(1,575)	1:A:16:ALA:HB1	1:A:23:GLU:HB3	9	0.02	0.03
(1,575)	1:A:16:ALA:HB2	1:A:23:GLU:HB2	9	0.02	0.03
(1,575)	1:A:16:ALA:HB2	1:A:23:GLU:HB3	9	0.02	0.03
(1,575)	1:A:16:ALA:HB3	1:A:23:GLU:HB2	9	0.02	0.03
(1,575)	1:A:16:ALA:HB3	1:A:23:GLU:HB3	9	0.02	0.03
(1,1125)	1:A:144:LEU:O	1:A:33:ILE:H	9	0.02	0.05
(1,1075)	1:A:55:SER:O	1:A:59:GLN:H	9	0.02	0.04
(1,977)	1:A:100:GLN:H	1:A:100:GLN:HB3	8	0.06	0.07
(1,768)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:119:GLU:HG2	8	0.02	0.03
(1,768)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:119:GLU:HG3	8	0.02	0.03
(1,768)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:119:GLU:HG2	8	0.02	0.03
(1,768)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:119:GLU:HG3	8	0.02	0.03
(1,768)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:119:GLU:HG2	8	0.02	0.03
(1,768)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:119:GLU:HG3	8	0.02	0.03
(1,722)	1:A:57:LEU:HB2	1:A:111:LEU:HD11	8	0.01	0.03
(1,722)	1:A:57:LEU:HB2	1:A:111:LEU:HD12	8	0.01	0.03
(1,722)	1:A:57:LEU:HB2	1:A:111:LEU:HD13	8	0.01	0.03
(1,722)	1:A:57:LEU:HB3	1:A:111:LEU:HD11	8	0.01	0.03
(1,722)	1:A:57:LEU:HB3	1:A:111:LEU:HD12	8	0.01	0.03
(1,722)	1:A:57:LEU:HB3	1:A:111:LEU:HD13	8	0.01	0.03
(1,715)	1:A:53:THR:HG21	1:A:55:SER:HG	8	0.03	0.06
(1,715)	1:A:53:THR:HG22	1:A:55:SER:HG	8	0.03	0.06
(1,715)	1:A:53:THR:HG23	1:A:55:SER:HG	8	0.03	0.06
(1,1044)	1:A:138:ARG:H	1:A:138:ARG:HB3	8	0.08	0.1
(1,991)	1:A:109:ARG:H	1:A:109:ARG:HB3	7	0.07	0.08
(1,835)	1:A:111:LEU:HD11	1:A:114:MET:HE1	7	0.02	0.03
(1,835)	1:A:111:LEU:HD11	1:A:114:MET:HE2	7	0.02	0.03
(1,835)	1:A:111:LEU:HD11	1:A:114:MET:HE3	7	0.02	0.03
(1,835)	1:A:111:LEU:HD12	1:A:114:MET:HE1	7	0.02	0.03



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

(1,835)         1:A:111:LEU:HD12         1:A:114:MET:HE2         7         0.02         0.03           (1,835)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:114:MET:HE3         7         0.02         0.03           (1,835)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:114:MET:HE2         7         0.02         0.03           (1,835)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:114:MET:HE2         7         0.02         0.03           (1,835)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:116:VAL:HG21         7         0.02         0.03           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         7         0.02         0.04           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         7         0.02         0.04           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         7         0.02         0.04           (1,470)         1:A:52:ILE:HB         1:A:56:LEU:HD12         6         0.02         0.04           (1,704)         1:A:52:ILE:HB         1:A:56:LEU:HD13         6         0.02         0.04           (1,747)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD22         6         0.01	Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,835) 1:A:111:LEU:HD13 1:A:114:MET:HE1 7 0.02 0.03 (1,835) 1:A:111:LEU:HD13 1:A:114:MET:HE2 7 0.02 0.03 (1,835) 1:A:111:LEU:HD13 1:A:114:MET:HE3 7 0.02 0.03 (1,415) 1:A:88:ALA:H 1:A:116:VAL:HG21 7 0.02 0.04 (1,415) 1:A:88:ALA:H 1:A:116:VAL:HG21 7 0.02 0.04 (1,415) 1:A:88:ALA:H 1:A:116:VAL:HG21 7 0.02 0.04 (1,415) 1:A:88:ALA:H 1:A:116:VAL:HG22 7 0.02 0.04 (1,415) 1:A:88:ALA:H 1:A:116:VAL:HG23 7 0.02 0.04 (1,704) 1:A:52:ILE:HB 1:A:56:LEU:HD11 6 0.02 0.04 (1,704) 1:A:52:ILE:HB 1:A:56:LEU:HD12 6 0.02 0.04 (1,704) 1:A:52:ILE:HB 1:A:56:LEU:HD13 6 0.02 0.04 (1,479) 1:A:48:ARG:HA 1:A:145:LEU:HD21 6 0.01 0.02 (1,479) 1:A:48:ARG:HA 1:A:145:LEU:HD22 6 0.01 0.02 (1,479) 1:A:48:ARG:HA 1:A:145:LEU:HD23 6 0.01 0.02 (1,479) 1:A:48:ARG:HA 1:A:145:LEU:HD23 6 0.01 0.02 (1,479) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB1 5 0.02 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB1 5 0.02 0.04 (1,750) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB2 5 0.02 0.04 (1,750) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB2 5 0.02 0.04 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB3 5 0.02 0.04 (1,695) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:56:LEU:HD11 5 0.02 0.04 (1,695) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:56:LEU:HD13 5 0.02 0.04 (1,695) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:56:LEU:HD11 5 0.02 0.04 (1,695) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:56:LEU:HD13 5 0.02 0.04 (1,695) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:56:LEU:HD13 5 0.02 0.04	(1,835)	1:A:111:LEU:HD12	1:A:114:MET:HE2	7	0.02	0.03
(1,835)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:114:MET:HE2         7         0.02         0.03           (1,835)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:114:MET:HE3         7         0.02         0.03           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         7         0.02         0.04           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         7         0.02         0.04           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         7         0.02         0.04           (1,704)         1:A:85:LIE:HB         1:A:56:LEU:HD11         6         0.02         0.04           (1,704)         1:A:52:ILE:HB         1:A:56:LEU:HD12         6         0.02         0.04           (1,704)         1:A:55:ILE:HB         1:A:56:LEU:HD13         6         0.02         0.04           (1,704)         1:A:52:ILE:HB         1:A:56:LEU:HD13         6         0.02         0.04           (1,704)         1:A:45:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD22         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD22         6         0.01         0.0	(1,835)	1:A:111:LEU:HD12	1:A:114:MET:HE3	7	0.02	0.03
(1,835)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:114:MET:HE3         7         0.02         0.03           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         7         0.02         0.04           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         7         0.02         0.04           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         7         0.02         0.04           (1,704)         1:A:52:ILE:HB         1:A:56:LEU:HD11         6         0.02         0.04           (1,704)         1:A:52:ILE:HB         1:A:56:LEU:HD12         6         0.02         0.04           (1,704)         1:A:52:ILE:HB         1:A:56:LEU:HD13         6         0.02         0.04           (1,704)         1:A:52:ILE:HB         1:A:56:LEU:HD13         6         0.02         0.04           (1,7704)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD22         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD23         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD23         6         0.01         0.02	(1,835)	1:A:111:LEU:HD13	1:A:114:MET:HE1	7	0.02	0.03
(1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         7         0.02         0.04           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         7         0.02         0.04           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         7         0.02         0.04           (1,704)         1:A:55:ILE:HB         1:A:56:LEU:HD11         6         0.02         0.04           (1,704)         1:A:52:ILE:HB         1:A:56:LEU:HD12         6         0.02         0.04           (1,704)         1:A:52:ILE:HB         1:A:56:LEU:HD13         6         0.02         0.04           (1,704)         1:A:52:ILE:HB         1:A:56:LEU:HD13         6         0.02         0.04           (1,704)         1:A:52:ILE:HB         1:A:56:LEU:HD21         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD23         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:137:GLY:H         5         0.02         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:48:ALA:HB1         5         0.02         0.04	(1,835)	1:A:111:LEU:HD13	1:A:114:MET:HE2	7	0.02	0.03
(1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         7         0.02         0.04           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         7         0.02         0.04           (1,704)         1:A:52:ILE:HB         1:A:56:LEU:HD11         6         0.02         0.04           (1,704)         1:A:52:ILE:HB         1:A:56:LEU:HD12         6         0.02         0.04           (1,704)         1:A:52:ILE:HB         1:A:66:LEU:HD13         6         0.02         0.04           (1,704)         1:A:56:REU:HB         1:A:65:LEU:HD13         6         0.02         0.04           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD23         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD23         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD23         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:46:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD23         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:48:ALA:HB1         5         0.02         0.04 <td>(1,835)</td> <td>1:A:111:LEU:HD13</td> <td>1:A:114:MET:HE3</td> <td>7</td> <td>0.02</td> <td>0.03</td>	(1,835)	1:A:111:LEU:HD13	1:A:114:MET:HE3	7	0.02	0.03
(1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         7         0.02         0.04           (1,704)         1:A:52:ILE:HB         1:A:56:LEU:HD11         6         0.02         0.04           (1,704)         1:A:52:ILE:HB         1:A:56:LEU:HD12         6         0.02         0.04           (1,704)         1:A:52:ILE:HB         1:A:56:LEU:HD13         6         0.02         0.04           (1,704)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD22         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD23         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:46:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD23         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:46:ARIB:B         1:A:46:ALEU:HB2         1:A:48:ALA:HB3         5	(1,415)	1:A:88:ALA:H	1:A:116:VAL:HG21	7	0.02	0.04
(1,704)         1:A:52:ILE:HB         1:A:56:LEU:HD11         6         0.02         0.04           (1,704)         1:A:52:ILE:HB         1:A:56:LEU:HD12         6         0.02         0.04           (1,704)         1:A:52:ILE:HB         1:A:56:LEU:HD13         6         0.02         0.04           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD22         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD23         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD23         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD23         6         0.01         0.02           (1,33)         1:A:136:GLU:HB         1:A:48:ALA:HB1         5         0.02         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB2         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB2         5         0.02         0.04 <td>(1,415)</td> <td>1:A:88:ALA:H</td> <td>1:A:116:VAL:HG22</td> <td>7</td> <td>0.02</td> <td>0.04</td>	(1,415)	1:A:88:ALA:H	1:A:116:VAL:HG22	7	0.02	0.04
(1,704)         1:A:52:ILE:HB         1:A:56:LEU:HD12         6         0.02         0.04           (1,704)         1:A:52:ILE:HB         1:A:56:LEU:HD13         6         0.02         0.04           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD22         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD23         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD23         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:137:GLY:H         5         0.02         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB1         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB1         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04	(1,415)	1:A:88:ALA:H	1:A:116:VAL:HG23	7	0.02	0.04
(1,704)         1:A:52:ILE:HB         1:A:56:LEU:HD13         6         0.02         0.04           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD22         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD23         6         0.01         0.02           (1,33)         1:A:136:GLU:HA         1:A:137:GLY:H         5         0.02         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB1         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB1         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04 <td>(1,704)</td> <td>1:A:52:ILE:HB</td> <td>1:A:56:LEU:HD11</td> <td>6</td> <td>0.02</td> <td>0.04</td>	(1,704)	1:A:52:ILE:HB	1:A:56:LEU:HD11	6	0.02	0.04
(1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD22         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD23         6         0.01         0.02           (1,93)         1:A:136:GLU:HA         1:A:137:GLY:H         5         0.02         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB1         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB1         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB2         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04 <td>(1,704)</td> <td>1:A:52:ILE:HB</td> <td>1:A:56:LEU:HD12</td> <td>6</td> <td>0.02</td> <td>0.04</td>	(1,704)	1:A:52:ILE:HB	1:A:56:LEU:HD12	6	0.02	0.04
(1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD22         6         0.01         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD23         6         0.01         0.02           (1,93)         1:A:136:GLU:HA         1:A:137:GLY:H         5         0.02         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB1         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB1         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB2         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD12         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04 </td <td>(1,704)</td> <td>1:A:52:ILE:HB</td> <td>1:A:56:LEU:HD13</td> <td>6</td> <td>0.02</td> <td>0.04</td>	(1,704)	1:A:52:ILE:HB	1:A:56:LEU:HD13	6	0.02	0.04
(1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD23         6         0.01         0.02           (1,93)         1:A:136:GLU:HA         1:A:137:GLY:H         5         0.02         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB1         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB2         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB2         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB2         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD12         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04 <td>(1,479)</td> <td>1:A:48:ARG:HA</td> <td>1:A:145:LEU:HD21</td> <td>6</td> <td>0.01</td> <td>0.02</td>	(1,479)	1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD21	6	0.01	0.02
(1,93)         1:A:136:GLU:HA         1:A:137:GLY:H         5         0.02         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB1         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB2         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04 </td <td>(1,479)</td> <td>1:A:48:ARG:HA</td> <td>1:A:145:LEU:HD22</td> <td>6</td> <td>0.01</td> <td>0.02</td>	(1,479)	1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD22	6	0.01	0.02
(1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB1         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB2         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB1         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:64:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD12         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:56:LEU:HD12         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02	(1,479)	1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD23	6	0.01	0.02
(1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB2         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB1         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB2         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD12         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02 <t< td=""><td>(1,93)</td><td>1:A:136:GLU:HA</td><td>1:A:137:GLY:H</td><td>5</td><td>0.02</td><td>0.03</td></t<>	(1,93)	1:A:136:GLU:HA	1:A:137:GLY:H	5	0.02	0.03
(1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB1         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB2         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD12         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:56:LEU:HD12         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02	(1,750)	1:A:63:LEU:HB2	1:A:88:ALA:HB1	5	0.02	0.04
(1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB1         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB2         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD12         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:56:LEU:HD12         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02	(1,750)	1:A:63:LEU:HB2	1:A:88:ALA:HB2	5	0.02	0.04
(1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB2         5         0.02         0.04           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD12         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:56:LEU:HD12         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD12         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD12         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:34:EVAL:HG23         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:34:6:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02	(1,750)	1:A:63:LEU:HB2	1:A:88:ALA:HB3	5	0.02	0.04
(1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD12         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:56:LEU:HD12         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD12         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:346:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:346:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,697)         1:A:33:HIS:HE1         1:A:33:ILE:HG21         5         0.03	(1,750)	1:A:63:LEU:HB3	1:A:88:ALA:HB1	5	0.02	0.04
(1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD12         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:56:LEU:HD12         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD12         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:346:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,697)         1:A:31:HIS:HE1         1:A:33:ILE:HG21         5         0.03         0.05           (1,617)         1:A:31:HIS:HE1         1:A:33:ILE:HG22         5         0.03         0.05           (1,617)         1:A:24:VAL:HB         1:A:29:PHE:HE1         5         0.01	(1,750)	1:A:63:LEU:HB3	1:A:88:ALA:HB2	5	0.02	0.04
(1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD12         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:56:LEU:HD12         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD12         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD12         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,697)         1:A:31:HIS:HE1         1:A:33:ILE:HG21         5         0.06         0.13           (1,617)         1:A:31:HIS:HE1         1:A:33:ILE:HG22         5         0.03         0.05           (1,617)         1:A:31:HIS:HE1         1:A:33:ILE:HG23         5         0.03	(1,750)	1:A:63:LEU:HB3	1:A:88:ALA:HB3	5	0.02	0.04
(1,695)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:56:LEU:HD12         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD12         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:38:GLU:HA         1:A:39:GLY:H         5         0.02         0.04           (1,697)         1:A:31:HIS:HE1         1:A:33:ILE:HG21         5         0.03         0.05           (1,617)         1:A:31:HIS:HE1         1:A:33:ILE:HG23         5         0.03         0.05           (1,597)         1:A:24:VAL:HB         1:A:29:PHE:HE1         5         0.01         0.02	(1,695)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:56:LEU:HD11	5	0.02	0.04
(1,695)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:56:LEU:HD12         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD12         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:38:GLU:HA         1:A:39:GLY:H         5         0.02         0.04           (1,697)         1:A:31:HIS:HE1         1:A:33:ILE:HG21         5         0.03         0.05           (1,617)         1:A:31:HIS:HE1         1:A:33:ILE:HG22         5         0.03         0.05           (1,617)         1:A:31:HIS:HE1         1:A:33:ILE:HG23         5         0.03         0.05           (1,597)         1:A:24:VAL:HB         1:A:29:PHE:HE1         5         0.01         0.02	(1,695)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:56:LEU:HD12	5	0.02	0.04
(1,695)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:56:LEU:HD12         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD11         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD12         5         0.02         0.04           (1,695)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:56:LEU:HD13         5         0.02         0.04           (1,69)         1:A:38:GLU:HA         1:A:39:GLY:H         5         0.06         0.13           (1,617)         1:A:31:HIS:HE1         1:A:33:ILE:HG21         5         0.03         0.05           (1,617)         1:A:31:HIS:HE1         1:A:33:ILE:HG22         5         0.03         0.05           (1,617)         1:A:31:HIS:HE1         1:A:33:ILE:HG23         5         0.03         0.05           (1,597)         1:A:24:VAL:HB         1:A:29:PHE:HE1         5         0.01         0.02	(1,695)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:56:LEU:HD13	5	0.02	0.04
(1,695)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:56:LEU:HD13       5       0.02       0.04         (1,695)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:56:LEU:HD11       5       0.02       0.04         (1,695)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:56:LEU:HD12       5       0.02       0.04         (1,695)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:56:LEU:HD13       5       0.02       0.04         (1,69)       1:A:38:GLU:HA       1:A:39:GLY:H       5       0.06       0.13         (1,617)       1:A:31:HIS:HE1       1:A:33:ILE:HG21       5       0.03       0.05         (1,617)       1:A:31:HIS:HE1       1:A:33:ILE:HG22       5       0.03       0.05         (1,617)       1:A:31:HIS:HE1       1:A:33:ILE:HG23       5       0.03       0.05         (1,597)       1:A:24:VAL:HB       1:A:29:PHE:HE1       5       0.01       0.02	(1,695)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:56:LEU:HD11	5	0.02	0.04
(1,695)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:56:LEU:HD11       5       0.02       0.04         (1,695)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:56:LEU:HD12       5       0.02       0.04         (1,695)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:56:LEU:HD13       5       0.02       0.04         (1,69)       1:A:38:GLU:HA       1:A:39:GLY:H       5       0.06       0.13         (1,617)       1:A:31:HIS:HE1       1:A:33:ILE:HG21       5       0.03       0.05         (1,617)       1:A:31:HIS:HE1       1:A:33:ILE:HG22       5       0.03       0.05         (1,617)       1:A:31:HIS:HE1       1:A:33:ILE:HG23       5       0.03       0.05         (1,597)       1:A:24:VAL:HB       1:A:29:PHE:HE1       5       0.01       0.02	(1,695)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:56:LEU:HD12	5	0.02	0.04
(1,695)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:56:LEU:HD12       5       0.02       0.04         (1,695)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:56:LEU:HD13       5       0.02       0.04         (1,69)       1:A:38:GLU:HA       1:A:39:GLY:H       5       0.06       0.13         (1,617)       1:A:31:HIS:HE1       1:A:33:ILE:HG21       5       0.03       0.05         (1,617)       1:A:31:HIS:HE1       1:A:33:ILE:HG22       5       0.03       0.05         (1,617)       1:A:31:HIS:HE1       1:A:33:ILE:HG23       5       0.03       0.05         (1,597)       1:A:24:VAL:HB       1:A:29:PHE:HE1       5       0.01       0.02	(1,695)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:56:LEU:HD13	5	0.02	0.04
(1,695)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:56:LEU:HD13       5       0.02       0.04         (1,69)       1:A:38:GLU:HA       1:A:39:GLY:H       5       0.06       0.13         (1,617)       1:A:31:HIS:HE1       1:A:33:ILE:HG21       5       0.03       0.05         (1,617)       1:A:31:HIS:HE1       1:A:33:ILE:HG22       5       0.03       0.05         (1,617)       1:A:31:HIS:HE1       1:A:33:ILE:HG23       5       0.03       0.05         (1,597)       1:A:24:VAL:HB       1:A:29:PHE:HE1       5       0.01       0.02	(1,695)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:56:LEU:HD11	5	0.02	0.04
(1,69)       1:A:38:GLU:HA       1:A:39:GLY:H       5       0.06       0.13         (1,617)       1:A:31:HIS:HE1       1:A:33:ILE:HG21       5       0.03       0.05         (1,617)       1:A:31:HIS:HE1       1:A:33:ILE:HG22       5       0.03       0.05         (1,617)       1:A:31:HIS:HE1       1:A:33:ILE:HG23       5       0.03       0.05         (1,597)       1:A:24:VAL:HB       1:A:29:PHE:HE1       5       0.01       0.02	(1,695)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:56:LEU:HD12	5	0.02	0.04
(1,617)       1:A:31:HIS:HE1       1:A:33:ILE:HG21       5       0.03       0.05         (1,617)       1:A:31:HIS:HE1       1:A:33:ILE:HG22       5       0.03       0.05         (1,617)       1:A:31:HIS:HE1       1:A:33:ILE:HG23       5       0.03       0.05         (1,597)       1:A:24:VAL:HB       1:A:29:PHE:HE1       5       0.01       0.02	(1,695)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:56:LEU:HD13	5	0.02	0.04
(1,617)       1:A:31:HIS:HE1       1:A:33:ILE:HG22       5       0.03       0.05         (1,617)       1:A:31:HIS:HE1       1:A:33:ILE:HG23       5       0.03       0.05         (1,597)       1:A:24:VAL:HB       1:A:29:PHE:HE1       5       0.01       0.02	(1,69)	1:A:38:GLU:HA	1:A:39:GLY:H	5	0.06	0.13
(1,617)       1:A:31:HIS:HE1       1:A:33:ILE:HG23       5       0.03       0.05         (1,597)       1:A:24:VAL:HB       1:A:29:PHE:HE1       5       0.01       0.02	(1,617)	1:A:31:HIS:HE1	1:A:33:ILE:HG21	5	0.03	0.05
(1,597) 1:A:24:VAL:HB 1:A:29:PHE:HE1 5 0.01 0.02	(1,617)	1:A:31:HIS:HE1	1:A:33:ILE:HG22	5	0.03	0.05
(1,597) 1:A:24:VAL:HB 1:A:29:PHE:HE1 5 0.01 0.02	(1,617)	1:A:31:HIS:HE1	1:A:33:ILE:HG23	5	0.03	0.05
(1.597) $1 \cdot A \cdot 24 \cdot VAI \cdot HB$ $1 \cdot A \cdot 29 \cdot PHE \cdot HE2$ 5 0.01 0.02		1:A:24:VAL:HB	1:A:29:PHE:HE1	5	0.01	0.02
(1,001)   1.11.24.7111.1110   1.11.20.11112.11102   0   0.01   0.02	(1,597)	1:A:24:VAL:HB	1:A:29:PHE:HE2	5	0.01	0.02
(1,413) 1:A:53:THR:H 1:A:56:LEU:HD11 5 0.01 0.02	(1,413)	1:A:53:THR:H	1:A:56:LEU:HD11	5	0.01	0.02
(1,413) 1:A:53:THR:H 1:A:56:LEU:HD12 5 0.01 0.02		1:A:53:THR:H	1:A:56:LEU:HD12	5	0.01	0.02
(1,413) 1:A:53:THR:H 1:A:56:LEU:HD13 5 0.01 0.02	(1,413)	1:A:53:THR:H	1:A:56:LEU:HD13	5	0.01	0.02
(1,1109) 1:A:128:ARG:O 1:A:132:ILE:H 5 0.03 0.04	(1,1109)	1:A:128:ARG:O	1:A:132:ILE:H	5	0.03	0.04
(1,858) 1:A:123:THR:HG21 1:A:144:LEU:HD21 4 0.01 0.02	(1,858)	1:A:123:THR:HG21	1:A:144:LEU:HD21	4	0.01	0.02
(1,858) 1:A:123:THR:HG21 1:A:144:LEU:HD22 4 0.01 0.02	, ,	1:A:123:THR:HG21	1:A:144:LEU:HD22	4	0.01	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,858)	1:A:123:THR:HG21	1:A:144:LEU:HD23	4	0.01	0.02
(1,858)	1:A:123:THR:HG22	1:A:144:LEU:HD21	4	0.01	0.02
(1,858)	1:A:123:THR:HG22	1:A:144:LEU:HD22	4	0.01	0.02
(1,858)	1:A:123:THR:HG22	1:A:144:LEU:HD23	4	0.01	0.02
(1,858)	1:A:123:THR:HG23	1:A:144:LEU:HD21	4	0.01	0.02
(1,858)	1:A:123:THR:HG23	1:A:144:LEU:HD22	4	0.01	0.02
(1,858)	1:A:123:THR:HG23	1:A:144:LEU:HD23	4	0.01	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB1	1:A:114:MET:HE1	4	0.02	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB1	1:A:114:MET:HE2	4	0.02	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB1	1:A:114:MET:HE3	4	0.02	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB2	1:A:114:MET:HE1	4	0.02	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB2	1:A:114:MET:HE2	4	0.02	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB2	1:A:114:MET:HE3	4	0.02	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB3	1:A:114:MET:HE1	4	0.02	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB3	1:A:114:MET:HE2	4	0.02	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB3	1:A:114:MET:HE3	4	0.02	0.02
(1,713)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:56:LEU:HD21	4	0.02	0.03
(1,713)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:56:LEU:HD22	4	0.02	0.03
(1,713)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:56:LEU:HD23	4	0.02	0.03
(1,713)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:56:LEU:HD21	4	0.02	0.03
(1,713)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:56:LEU:HD22	4	0.02	0.03
(1,713)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:56:LEU:HD23	4	0.02	0.03
(1,713)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:56:LEU:HD21	4	0.02	0.03
(1,713)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:56:LEU:HD22	4	0.02	0.03
(1,713)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:56:LEU:HD23	4	0.02	0.03
(1,702)	1:A:49:PRO:HB2	1:A:98:ARG:HB2	4	0.01	0.02
(1,702)	1:A:49:PRO:HB2	1:A:98:ARG:HB3	4	0.01	0.02
(1,702)	1:A:49:PRO:HB3	1:A:98:ARG:HB2	4	0.01	0.02
(1,702)	1:A:49:PRO:HB3	1:A:98:ARG:HB3	4	0.01	0.02
(1,614)	1:A:29:PHE:HE1	1:A:41:VAL:HB	4	0.01	0.02
(1,614)	1:A:29:PHE:HE2	1:A:41:VAL:HB	4	0.01	0.02
(1,57)	1:A:19:ASP:HA	1:A:20:GLY:H	4	0.04	0.05
(1,558)	1:A:13:THR:HB	1:A:15:THR:HG21	4	0.02	0.03
(1,558)	1:A:13:THR:HB	1:A:15:THR:HG22	4	0.02	0.03
(1,558)	1:A:13:THR:HB	1:A:15:THR:HG23	4	0.02	0.03
(1,398)	1:A:121:MET:HE1	1:A:130:TYR:H	4	0.01	0.03
(1,398)	1:A:121:MET:HE2	1:A:130:TYR:H	4	0.01	0.03
(1,398)	1:A:121:MET:HE3	1:A:130:TYR:H	4	0.01	0.03
(1,393)	1:A:96:THR:HG21	1:A:101:HIS:H	4	0.01	0.02
(1,393)	1:A:96:THR:HG22	1:A:101:HIS:H	4	0.01	0.02
(1,393)	1:A:96:THR:HG23	1:A:101:HIS:H	4	0.01	0.02
(1,221)	1:A:63:LEU:HD11	1:A:64:ALA:H	4	0.05	0.08



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,221)	1:A:63:LEU:HD12	1:A:64:ALA:H	4	0.05	0.08
(1,221)	1:A:63:LEU:HD13	1:A:64:ALA:H	4	0.05	0.08
(1,1122)	1:A:143:ALA:O	1:A:95:GLY:N	4	0.02	0.03
(1,1116)	1:A:139:ARG:O	1:A:91:VAL:N	4	0.03	0.04
(1,1115)	1:A:132:ILE:O	1:A:136:GLU:H	4	0.02	0.02
(1,1090)	1:A:117:GLY:O	1:A:92:LEU:N	4	0.02	0.03
(1,107)	1:A:147:ASP:HA	1:A:149:ASP:H	4	0.05	0.09
(1,75)	1:A:87:ASN:HA	1:A:88:ALA:H	3	0.02	0.03
(1,739)	1:A:61:ALA:HB1	1:A:114:MET:HE1	3	0.02	0.04
(1,739)	1:A:61:ALA:HB1	1:A:114:MET:HE2	3	0.02	0.04
(1,739)	1:A:61:ALA:HB1	1:A:114:MET:HE3	3	0.02	0.04
(1,739)	1:A:61:ALA:HB2	1:A:114:MET:HE1	3	0.02	0.04
(1,739)	1:A:61:ALA:HB2	1:A:114:MET:HE2	3	0.02	0.04
(1,739)	1:A:61:ALA:HB2	1:A:114:MET:HE3	3	0.02	0.04
(1,739)	1:A:61:ALA:HB3	1:A:114:MET:HE1	3	0.02	0.04
(1,739)	1:A:61:ALA:HB3	1:A:114:MET:HE2	3	0.02	0.04
(1,739)	1:A:61:ALA:HB3	1:A:114:MET:HE3	3	0.02	0.04
(1,676)	1:A:44:TRP:HZ3	1:A:145:LEU:HD21	3	0.02	0.02
(1,676)	1:A:44:TRP:HZ3	1:A:145:LEU:HD22	3	0.02	0.02
(1,676)	1:A:44:TRP:HZ3	1:A:145:LEU:HD23	3	0.02	0.02
(1,673)	1:A:44:TRP:HZ2	1:A:94:VAL:HG21	3	0.02	0.03
(1,673)	1:A:44:TRP:HZ2	1:A:94:VAL:HG22	3	0.02	0.03
(1,673)	1:A:44:TRP:HZ2	1:A:94:VAL:HG23	3	0.02	0.03
(1,663)	1:A:44:TRP:HH2	1:A:46:VAL:HG11	3	0.04	0.06
(1,663)	1:A:44:TRP:HH2	1:A:46:VAL:HG12	3	0.04	0.06
(1,663)	1:A:44:TRP:HH2	1:A:46:VAL:HG13	3	0.04	0.06
(1,547)	1:A:132:ILE:HG21	1:A:136:GLU:HA	3	0.01	0.02
(1,547)	1:A:132:ILE:HG22	1:A:136:GLU:HA	3	0.01	0.02
(1,547)	1:A:132:ILE:HG23	1:A:136:GLU:HA	3	0.01	0.02
(1,535)	1:A:119:GLU:HA	1:A:121:MET:HE1	3	0.02	0.03
(1,535)	1:A:119:GLU:HA	1:A:121:MET:HE2	3	0.02	0.03
(1,535)	1:A:119:GLU:HA	1:A:121:MET:HE3	3	0.02	0.03
(1,477)	1:A:47:GLN:HA	1:A:146:PRO:HD2	3	0.02	0.03
(1,477)	1:A:47:GLN:HA	1:A:146:PRO:HD3	3	0.02	0.03
(1,449)	1:A:17:TYR:HB2	1:A:22:ILE:HA	3	0.04	0.07
(1,449)	1:A:17:TYR:HB3	1:A:22:ILE:HA	3	0.04	0.07
(1,438)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:37:PRO:HA	3	0.02	0.03
(1,438)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:37:PRO:HA	3	0.02	0.03
(1,438)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:37:PRO:HA	3	0.02	0.03
(1,428)	1:A:97:GLY:H	1:A:123:THR:HB	3	0.01	0.02
(1,365)	1:A:14:VAL:HG21	1:A:23:GLU:H	3	0.01	0.02
(1,365)	1:A:14:VAL:HG22	1:A:23:GLU:H	3	0.01	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,365)	1:A:14:VAL:HG23	1:A:23:GLU:H	3	0.01	0.02
(1,23)	1:A:86:ALA:H	1:A:87:ASN:H	3	0.03	0.04
(1,1101)	1:A:124:GLN:O	1:A:128:ARG:H	3	0.02	0.03
(1,859)	1:A:124:GLN:HG2	1:A:128:ARG:HB2	2	0.03	0.04
(1,859)	1:A:124:GLN:HG2	1:A:128:ARG:HB3	2	0.03	0.04
(1,859)	1:A:124:GLN:HG3	1:A:128:ARG:HB2	2	0.03	0.04
(1,859)	1:A:124:GLN:HG3	1:A:128:ARG:HB3	2	0.03	0.04
(1,817)	1:A:101:HIS:HB2	1:A:103:LEU:HG	2	0.01	0.02
(1,817)	1:A:101:HIS:HB3	1:A:103:LEU:HG	2	0.01	0.02
(1,816)	1:A:100:GLN:HG2	1:A:120:ALA:HB1	2	0.03	0.05
(1,816)	1:A:100:GLN:HG2	1:A:120:ALA:HB2	2	0.03	0.05
(1,816)	1:A:100:GLN:HG2	1:A:120:ALA:HB3	2	0.03	0.05
(1,816)	1:A:100:GLN:HG3	1:A:120:ALA:HB1	2	0.03	0.05
(1,816)	1:A:100:GLN:HG3	1:A:120:ALA:HB2	2	0.03	0.05
(1,816)	1:A:100:GLN:HG3	1:A:120:ALA:HB3	2	0.03	0.05
(1,813)	1:A:96:THR:HG21	1:A:103:LEU:HD21	2	0.04	0.05
(1,813)	1:A:96:THR:HG21	1:A:103:LEU:HD22	2	0.04	0.05
(1,813)	1:A:96:THR:HG21	1:A:103:LEU:HD23	2	0.04	0.05
(1,813)	1:A:96:THR:HG22	1:A:103:LEU:HD21	2	0.04	0.05
(1,813)	1:A:96:THR:HG22	1:A:103:LEU:HD22	2	0.04	0.05
(1,813)	1:A:96:THR:HG22	1:A:103:LEU:HD23	2	0.04	0.05
(1,813)	1:A:96:THR:HG23	1:A:103:LEU:HD21	2	0.04	0.05
(1,813)	1:A:96:THR:HG23	1:A:103:LEU:HD22	2	0.04	0.05
(1,813)	1:A:96:THR:HG23	1:A:103:LEU:HD23	2	0.04	0.05
(1,778)	1:A:92:LEU:HD11	1:A:116:VAL:HG21	2	0.02	0.03
(1,778)	1:A:92:LEU:HD11	1:A:116:VAL:HG22	2	0.02	0.03
(1,778)	1:A:92:LEU:HD11	1:A:116:VAL:HG23	2	0.02	0.03
(1,778)	1:A:92:LEU:HD12	1:A:116:VAL:HG21	2	0.02	0.03
(1,778)	1:A:92:LEU:HD12	1:A:116:VAL:HG22	2	0.02	0.03
(1,778)	1:A:92:LEU:HD12	1:A:116:VAL:HG23	2	0.02	0.03
(1,778)	1:A:92:LEU:HD13	1:A:116:VAL:HG21	2	0.02	0.03
(1,778)	1:A:92:LEU:HD13	1:A:116:VAL:HG22	2	0.02	0.03
(1,778)	1:A:92:LEU:HD13	1:A:116:VAL:HG23	2	0.02	0.03
(1,761)	1:A:89:PRO:HB2	1:A:141:VAL:HG21	2	0.03	0.03
(1,761)	1:A:89:PRO:HB2	1:A:141:VAL:HG22	2	0.03	0.03
(1,761)	1:A:89:PRO:HB2	1:A:141:VAL:HG23	2	0.03	0.03
(1,761)	1:A:89:PRO:HB3	1:A:141:VAL:HG21	2	0.03	0.03
(1,761)	1:A:89:PRO:HB3	1:A:141:VAL:HG22	2	0.03	0.03
(1,761)	1:A:89:PRO:HB3	1:A:141:VAL:HG23	2	0.03	0.03
(1,755)	1:A:63:LEU:HD21	1:A:114:MET:HE1	2	0.01	0.01
(1,755)	1:A:63:LEU:HD21	1:A:114:MET:HE2	2	0.01	0.01
(1,755)	1:A:63:LEU:HD21	1:A:114:MET:HE3	2	0.01	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,755)	1:A:63:LEU:HD22	1:A:114:MET:HE1	2	0.01	0.01
(1,755)	1:A:63:LEU:HD22	1:A:114:MET:HE2	2	0.01	0.01
(1,755)	1:A:63:LEU:HD22	1:A:114:MET:HE3	2	0.01	0.01
(1,755)	1:A:63:LEU:HD23	1:A:114:MET:HE1	2	0.01	0.01
(1,755)	1:A:63:LEU:HD23	1:A:114:MET:HE2	2	0.01	0.01
(1,755)	1:A:63:LEU:HD23	1:A:114:MET:HE3	2	0.01	0.01
(1,751)	1:A:63:LEU:HD11	1:A:111:LEU:HB2	2	0.02	0.02
(1,751)	1:A:63:LEU:HD11	1:A:111:LEU:HB3	2	0.02	0.02
(1,751)	1:A:63:LEU:HD12	1:A:111:LEU:HB2	2	0.02	0.02
(1,751)	1:A:63:LEU:HD12	1:A:111:LEU:HB3	2	0.02	0.02
(1,751)	1:A:63:LEU:HD13	1:A:111:LEU:HB2	2	0.02	0.02
(1,751)	1:A:63:LEU:HD13	1:A:111:LEU:HB3	2	0.02	0.02
(1,719)	1:A:54:ALA:HB1	1:A:110:PRO:HG2	2	0.01	0.02
(1,719)	1:A:54:ALA:HB1	1:A:110:PRO:HG3	2	0.01	0.02
(1,719)	1:A:54:ALA:HB2	1:A:110:PRO:HG2	2	0.01	0.02
(1,719)	1:A:54:ALA:HB2	1:A:110:PRO:HG3	2	0.01	0.02
(1,719)	1:A:54:ALA:HB3	1:A:110:PRO:HG2	2	0.01	0.02
(1,719)	1:A:54:ALA:HB3	1:A:110:PRO:HG3	2	0.01	0.02
(1,700)	1:A:49:PRO:HB2	1:A:96:THR:HB	2	0.01	0.02
(1,700)	1:A:49:PRO:HB3	1:A:96:THR:HB	2	0.01	0.02
(1,690)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:145:LEU:HD21	2	0.06	0.06
(1,690)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:145:LEU:HD22	2	0.06	0.06
(1,690)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:145:LEU:HD23	2	0.06	0.06
(1,690)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:145:LEU:HD21	2	0.06	0.06
(1,690)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:145:LEU:HD22	2	0.06	0.06
(1,690)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:145:LEU:HD23	2	0.06	0.06
(1,690)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:145:LEU:HD21	2	0.06	0.06
(1,690)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:145:LEU:HD22	2	0.06	0.06
(1,690)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:145:LEU:HD23	2	0.06	0.06
(1,626)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:44:TRP:HB2	2	0.03	0.03
(1,626)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:44:TRP:HB3	2	0.03	0.03
(1,626)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:44:TRP:HB2	2	0.03	0.03
(1,626)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:44:TRP:HB3	2	0.03	0.03
(1,626)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:44:TRP:HB2	2	0.03	0.03
(1,626)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:44:TRP:HB3	2	0.03	0.03
(1,620)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:145:LEU:HD21	2	0.01	0.02
(1,620)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:145:LEU:HD22	2	0.01	0.02
(1,620)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:145:LEU:HD23	2	0.01	0.02
(1,620)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:145:LEU:HD21	2	0.01	0.02
(1,620)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:145:LEU:HD22	2	0.01	0.02
(1,620)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:145:LEU:HD23	2	0.01	0.02
(1,620)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:145:LEU:HD21	2	0.01	0.02



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

(1,620) (1,620)	1 A 00 AT A TIDO		Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1.620)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:145:LEU:HD22	2	0.01	0.02
(1,020)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:145:LEU:HD23	2	0.01	0.02
(1,553)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:134:MET:HE1	2	0.01	0.01
(1,553)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:134:MET:HE2	2	0.01	0.01
(1,553)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:134:MET:HE3	2	0.01	0.01
(1,553)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:134:MET:HE1	2	0.01	0.01
(1,553)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:134:MET:HE2	2	0.01	0.01
(1,553)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:134:MET:HE3	2	0.01	0.01
(1,553)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:134:MET:HE1	2	0.01	0.01
(1,553)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:134:MET:HE2	2	0.01	0.01
(1,553)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:134:MET:HE3	2	0.01	0.01
(1,552)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:134:MET:HE1	2	0.01	0.01
(1,552)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:134:MET:HE2	2	0.01	0.01
(1,552)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:134:MET:HE3	2	0.01	0.01
(1,526)	1:A:96:THR:HA	1:A:145:LEU:HD11	2	0.01	0.01
(1,526)	1:A:96:THR:HA	1:A:145:LEU:HD12	2	0.01	0.01
(1,526)	1:A:96:THR:HA	1:A:145:LEU:HD13	2	0.01	0.01
(1,525)	1:A:95:GLY:HA2	1:A:144:LEU:HD21	2	0.01	0.01
(1,525)	1:A:95:GLY:HA2	1:A:144:LEU:HD22	2	0.01	0.01
(1,525)	1:A:95:GLY:HA2	1:A:144:LEU:HD23	2	0.01	0.01
(1,525)	1:A:95:GLY:HA3	1:A:144:LEU:HD21	2	0.01	0.01
(1,525)	1:A:95:GLY:HA3	1:A:144:LEU:HD22	2	0.01	0.01
(1,525)	1:A:95:GLY:HA3	1:A:144:LEU:HD23	2	0.01	0.01
(1,499)	1:A:89:PRO:HA	1:A:139:ARG:HG2	2	0.03	0.04
(1,499)	1:A:89:PRO:HA	1:A:139:ARG:HG3	2	0.03	0.04
(1,498)	1:A:89:PRO:HA	1:A:139:ARG:HB2	2	0.02	0.03
(1,498)	1:A:89:PRO:HA	1:A:139:ARG:HB3	2	0.02	0.03
(1,487)	1:A:54:ALA:HB1	1:A:107:GLN:HA	2	0.01	0.01
(1,487)	1:A:54:ALA:HB2	1:A:107:GLN:HA	2	0.01	0.01
(1,487)	1:A:54:ALA:HB3	1:A:107:GLN:HA	2	0.01	0.01
(1,478)	1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD11	2	0.03	0.05
(1,478)	1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD12	2	0.03	0.05
(1,478)	1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD13	2	0.03	0.05
(1,467)	1:A:35:PHE:HB2	1:A:41:VAL:HA	2	0.01	0.01
(1,467)	1:A:35:PHE:HB3	1:A:41:VAL:HA	2	0.01	0.01
(1,450)	1:A:17:TYR:HD1	1:A:124:GLN:HA	2	0.01	0.02
(1,450)	1:A:17:TYR:HD2	1:A:124:GLN:HA	2	0.01	0.02
(1,367)	1:A:15:THR:HG21	1:A:26:GLN:H	2	0.02	0.03
(1,367)	1:A:15:THR:HG22	1:A:26:GLN:H	2	0.02	0.03
(1,367)	1:A:15:THR:HG23	1:A:26:GLN:H	2	0.02	0.03
(1,357)	1:A:23:GLU:HA	1:A:28:ARG:HA	2	0.03	0.06
(1,24)	1:A:87:ASN:H	1:A:88:ALA:H	2	0.03	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,22)	1:A:63:LEU:H	1:A:64:ALA:H	2	0.03	0.03
(1,13)	1:A:51:ASP:H	1:A:52:ILE:H	2	0.04	0.04
(1,1107)	1:A:127:ALA:O	1:A:131:ASN:H	2	0.01	0.01
(1,1099)	1:A:123:THR:O	1:A:127:ALA:H	2	0.01	0.01
(1,1079)	1:A:57:LEU:O	1:A:61:ALA:H	2	0.01	0.01
(1,1064)	1:A:34:ALA:O	1:A:42:ALA:N	2	0.01	0.01
(1,1060)	1:A:22:ILE:O	1:A:29:PHE:N	2	0.01	0.01
(1,100)	1:A:147:ASP:HA	1:A:148:GLY:H	2	0.04	0.05
(1,968)	1:A:92:LEU:H	1:A:92:LEU:HD21	1	0.01	0.01
(1,968)	1:A:92:LEU:H	1:A:92:LEU:HD22	1	0.01	0.01
(1,968)	1:A:92:LEU:H	1:A:92:LEU:HD23	1	0.01	0.01
(1,955)	1:A:58:GLN:HB2	1:A:58:GLN:HE21	1	0.03	0.03
(1,955)	1:A:58:GLN:HB2	1:A:58:GLN:HE22	1	0.03	0.03
(1,955)	1:A:58:GLN:HB3	1:A:58:GLN:HE21	1	0.03	0.03
(1,955)	1:A:58:GLN:HB3	1:A:58:GLN:HE22	1	0.03	0.03
(1,95)	1:A:139:ARG:HA	1:A:140:VAL:H	1	0.06	0.06
(1,875)	1:A:130:TYR:HE1	1:A:141:VAL:HG11	1	0.01	0.01
(1,875)	1:A:130:TYR:HE1	1:A:141:VAL:HG12	1	0.01	0.01
(1,875)	1:A:130:TYR:HE1	1:A:141:VAL:HG13	1	0.01	0.01
(1,875)	1:A:130:TYR:HE2	1:A:141:VAL:HG11	1	0.01	0.01
(1,875)	1:A:130:TYR:HE2	1:A:141:VAL:HG12	1	0.01	0.01
(1,875)	1:A:130:TYR:HE2	1:A:141:VAL:HG13	1	0.01	0.01
(1,837)	1:A:111:LEU:HD11	1:A:118:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,837)	1:A:111:LEU:HD11	1:A:118:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,837)	1:A:111:LEU:HD11	1:A:118:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,837)	1:A:111:LEU:HD12	1:A:118:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,837)	1:A:111:LEU:HD12	1:A:118:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,837)	1:A:111:LEU:HD12	1:A:118:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,837)	1:A:111:LEU:HD13	1:A:118:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,837)	1:A:111:LEU:HD13	1:A:118:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,837)	1:A:111:LEU:HD13	1:A:118:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,828)	1:A:105:PRO:HB2	1:A:109:ARG:HB2	1	0.03	0.03
(1,828)	1:A:105:PRO:HB2	1:A:109:ARG:HB3	1	0.03	0.03
(1,828)	1:A:105:PRO:HB3	1:A:109:ARG:HB2	1	0.03	0.03
(1,828)	1:A:105:PRO:HB3	1:A:109:ARG:HB3	1	0.03	0.03
(1,827)	1:A:105:PRO:HB2	1:A:108:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,827)	1:A:105:PRO:HB2	1:A:108:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,827)	1:A:105:PRO:HB2	1:A:108:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,827)	1:A:105:PRO:HB3	1:A:108:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,827)	1:A:105:PRO:HB3	1:A:108:VAL:HG22	1	0.01	0.01
· · /	1:A:105:PRO:HB3	1:A:108:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,827)	$1.\Lambda.100.1100.1100$	1.71.100. 1710.11020		0.01	



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,812)	1:A:96:THR:HG21	1:A:101:HIS:HB3	1	0.01	0.01
(1,812)	1:A:96:THR:HG22	1:A:101:HIS:HB2	1	0.01	0.01
(1,812)	1:A:96:THR:HG22	1:A:101:HIS:HB3	1	0.01	0.01
(1,812)	1:A:96:THR:HG23	1:A:101:HIS:HB2	1	0.01	0.01
(1,812)	1:A:96:THR:HG23	1:A:101:HIS:HB3	1	0.01	0.01
(1,811)	1:A:96:THR:HB	1:A:101:HIS:HB2	1	0.04	0.04
(1,811)	1:A:96:THR:HB	1:A:101:HIS:HB3	1	0.04	0.04
(1,799)	1:A:93:LEU:HD21	1:A:119:GLU:HB2	1	0.02	0.02
(1,799)	1:A:93:LEU:HD21	1:A:119:GLU:HB3	1	0.02	0.02
(1,799)	1:A:93:LEU:HD22	1:A:119:GLU:HB2	1	0.02	0.02
(1,799)	1:A:93:LEU:HD22	1:A:119:GLU:HB3	1	0.02	0.02
(1,799)	1:A:93:LEU:HD23	1:A:119:GLU:HB2	1	0.02	0.02
(1,799)	1:A:93:LEU:HD23	1:A:119:GLU:HB3	1	0.02	0.02
(1,770)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:140:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,770)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:140:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,770)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:140:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,770)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:140:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,770)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:140:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,770)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:140:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,770)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:140:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,770)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:140:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,770)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:140:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,746)	1:A:61:ALA:HB1	1:A:89:PRO:HG2	1	0.01	0.01
(1,746)	1:A:61:ALA:HB1	1:A:89:PRO:HG3	1	0.01	0.01
(1,746)	1:A:61:ALA:HB2	1:A:89:PRO:HG2	1	0.01	0.01
(1,746)	1:A:61:ALA:HB2	1:A:89:PRO:HG3	1	0.01	0.01
(1,746)	1:A:61:ALA:HB3	1:A:89:PRO:HG2	1	0.01	0.01
(1,746)	1:A:61:ALA:HB3	1:A:89:PRO:HG3	1	0.01	0.01
(1,728)	1:A:58:GLN:HB2	1:A:111:LEU:HD11	1	0.01	0.01
(1,728)	1:A:58:GLN:HB2	1:A:111:LEU:HD12	1	0.01	0.01
(1,728)	1:A:58:GLN:HB2	1:A:111:LEU:HD13	1	0.01	0.01
(1,728)	1:A:58:GLN:HB3	1:A:111:LEU:HD11	1	0.01	0.01
(1,728)	1:A:58:GLN:HB3	1:A:111:LEU:HD12	1	0.01	0.01
(1,728)	1:A:58:GLN:HB3	1:A:111:LEU:HD13	1	0.01	0.01
(1,701)	1:A:49:PRO:HB2	1:A:96:THR:HG21	1	0.01	0.01
(1,701)	1:A:49:PRO:HB2	1:A:96:THR:HG22	1	0.01	0.01
(1,701)	1:A:49:PRO:HB2	1:A:96:THR:HG23	1	0.01	0.01
(1,701)	1:A:49:PRO:HB3	1:A:96:THR:HG21	1	0.01	0.01
(1,701)	1:A:49:PRO:HB3	1:A:96:THR:HG22	1	0.01	0.01
(1,701)	1:A:49:PRO:HB3	1:A:96:THR:HG23	1	0.01	0.01
(1,698)	1:A:49:PRO:HB2	1:A:101:HIS:HB2	1	0.04	0.04
(1,698)	1:A:49:PRO:HB2	1:A:101:HIS:HB3	1	0.04	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,698)	1:A:49:PRO:HB3	1:A:101:HIS:HB2	1	0.04	0.04
(1,698)	1:A:49:PRO:HB3	1:A:101:HIS:HB3	1	0.04	0.04
(1,685)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:51:ASP:HB3	1	0.01	0.01
(1,685)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:51:ASP:HB3	1	0.01	0.01
(1,685)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:51:ASP:HB3	1	0.01	0.01
(1,653)	1:A:44:TRP:HD1	1:A:56:LEU:HD21	1	0.02	0.02
(1,653)	1:A:44:TRP:HD1	1:A:56:LEU:HD22	1	0.02	0.02
(1,653)	1:A:44:TRP:HD1	1:A:56:LEU:HD23	1	0.02	0.02
(1,650)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:38:GLU:HG2	1	0.06	0.06
(1,650)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:38:GLU:HG3	1	0.06	0.06
(1,650)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:38:GLU:HG2	1	0.06	0.06
(1,650)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:38:GLU:HG3	1	0.06	0.06
(1,650)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:38:GLU:HG2	1	0.06	0.06
(1,650)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:38:GLU:HG3	1	0.06	0.06
(1,640)	1:A:34:ALA:HB1	1:A:44:TRP:HB2	1	0.03	0.03
(1,640)	1:A:34:ALA:HB1	1:A:44:TRP:HB3	1	0.03	0.03
(1,640)	1:A:34:ALA:HB2	1:A:44:TRP:HB2	1	0.03	0.03
(1,640)	1:A:34:ALA:HB2	1:A:44:TRP:HB3	1	0.03	0.03
(1,640)	1:A:34:ALA:HB3	1:A:44:TRP:HB2	1	0.03	0.03
(1,640)	1:A:34:ALA:HB3	1:A:44:TRP:HB3	1	0.03	0.03
(1,639)	1:A:34:ALA:HB1	1:A:42:ALA:HB1	1	0.01	0.01
(1,639)	1:A:34:ALA:HB1	1:A:42:ALA:HB2	1	0.01	0.01
(1,639)	1:A:34:ALA:HB1	1:A:42:ALA:HB3	1	0.01	0.01
(1,639)	1:A:34:ALA:HB2	1:A:42:ALA:HB1	1	0.01	0.01
(1,639)	1:A:34:ALA:HB2	1:A:42:ALA:HB2	1	0.01	0.01
(1,639)	1:A:34:ALA:HB2	1:A:42:ALA:HB3	1	0.01	0.01
(1,639)	1:A:34:ALA:HB3	1:A:42:ALA:HB1	1	0.01	0.01
(1,639)	1:A:34:ALA:HB3	1:A:42:ALA:HB2	1	0.01	0.01
(1,639)	1:A:34:ALA:HB3	1:A:42:ALA:HB3	1	0.01	0.01
(1,625)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:44:TRP:HB3	1	0.01	0.01
(1,625)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:44:TRP:HB3	1	0.01	0.01
(1,625)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:44:TRP:HB3	1	0.01	0.01
(1,588)	1:A:22:ILE:HG21	1:A:127:ALA:HB1	1	0.03	0.03
(1,588)	1:A:22:ILE:HG21	1:A:127:ALA:HB2	1	0.03	0.03
(1,588)	1:A:22:ILE:HG21	1:A:127:ALA:HB3	1	0.03	0.03
(1,588)	1:A:22:ILE:HG22	1:A:127:ALA:HB1	1	0.03	0.03
(1,588)	1:A:22:ILE:HG22	1:A:127:ALA:HB2	1	0.03	0.03
(1,588)	1:A:22:ILE:HG22	1:A:127:ALA:HB3	1	0.03	0.03
(1,588)	1:A:22:ILE:HG23	1:A:127:ALA:HB1	1	0.03	0.03
(1,588)	1:A:22:ILE:HG23	1:A:127:ALA:HB2	1	0.03	0.03
(1,588)	1:A:22:ILE:HG23	1:A:127:ALA:HB3	1	0.03	0.03
(1,578)	1:A:17:TYR:HE1	1:A:22:ILE:HD11	1	0.01	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,578)	1:A:17:TYR:HE1	1:A:22:ILE:HD12	1	0.01	0.01
(1,578)	1:A:17:TYR:HE1	1:A:22:ILE:HD13	1	0.01	0.01
(1,578)	1:A:17:TYR:HE2	1:A:22:ILE:HD11	1	0.01	0.01
(1,578)	1:A:17:TYR:HE2	1:A:22:ILE:HD12	1	0.01	0.01
(1,578)	1:A:17:TYR:HE2	1:A:22:ILE:HD13	1	0.01	0.01
(1,577)	1:A:17:TYR:HE1	1:A:127:ALA:HB1	1	0.03	0.03
(1,577)	1:A:17:TYR:HE1	1:A:127:ALA:HB2	1	0.03	0.03
(1,577)	1:A:17:TYR:HE1	1:A:127:ALA:HB3	1	0.03	0.03
(1,577)	1:A:17:TYR:HE2	1:A:127:ALA:HB1	1	0.03	0.03
(1,577)	1:A:17:TYR:HE2	1:A:127:ALA:HB2	1	0.03	0.03
(1,577)	1:A:17:TYR:HE2	1:A:127:ALA:HB3	1	0.03	0.03
(1,574)	1:A:16:ALA:HB1	1:A:21:TYR:HE1	1	0.01	0.01
(1,574)	1:A:16:ALA:HB1	1:A:21:TYR:HE2	1	0.01	0.01
(1,574)	1:A:16:ALA:HB2	1:A:21:TYR:HE1	1	0.01	0.01
(1,574)	1:A:16:ALA:HB2	1:A:21:TYR:HE2	1	0.01	0.01
(1,574)	1:A:16:ALA:HB3	1:A:21:TYR:HE1	1	0.01	0.01
(1,574)	1:A:16:ALA:HB3	1:A:21:TYR:HE2	1	0.01	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG11	1:A:24:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG11	1:A:24:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG11	1:A:24:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG12	1:A:24:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG12	1:A:24:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG12	1:A:24:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG13	1:A:24:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG13	1:A:24:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG13	1:A:24:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG21	1:A:24:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG21	1:A:24:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG21	1:A:24:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG22	1:A:24:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG22	1:A:24:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG22	1:A:24:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG23	1:A:24:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG23	1:A:24:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG23	1:A:24:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG11	1:A:22:ILE:HG21	1	0.01	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG11	1:A:22:ILE:HG22	1	0.01	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG11	1:A:22:ILE:HG23	1	0.01	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG12	1:A:22:ILE:HG21	1	0.01	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG12	1:A:22:ILE:HG22	1	0.01	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG12	1:A:22:ILE:HG23	1	0.01	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG13	1:A:22:ILE:HG21	1	0.01	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,570)	1:A:14:VAL:HG13	1:A:22:ILE:HG22	1	0.01	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG13	1:A:22:ILE:HG23	1	0.01	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG21	1:A:22:ILE:HG21	1	0.01	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG21	1:A:22:ILE:HG22	1	0.01	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG21	1:A:22:ILE:HG23	1	0.01	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG22	1:A:22:ILE:HG21	1	0.01	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG22	1:A:22:ILE:HG22	1	0.01	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG22	1:A:22:ILE:HG23	1	0.01	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG23	1:A:22:ILE:HG21	1	0.01	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG23	1:A:22:ILE:HG22	1	0.01	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG23	1:A:22:ILE:HG23	1	0.01	0.01
(1,560)	1:A:13:THR:HG21	1:A:15:THR:HG21	1	0.01	0.01
(1,560)	1:A:13:THR:HG21	1:A:15:THR:HG22	1	0.01	0.01
(1,560)	1:A:13:THR:HG21	1:A:15:THR:HG23	1	0.01	0.01
(1,560)	1:A:13:THR:HG22	1:A:15:THR:HG21	1	0.01	0.01
(1,560)	1:A:13:THR:HG22	1:A:15:THR:HG22	1	0.01	0.01
(1,560)	1:A:13:THR:HG22	1:A:15:THR:HG23	1	0.01	0.01
(1,560)	1:A:13:THR:HG23	1:A:15:THR:HG21	1	0.01	0.01
(1,560)	1:A:13:THR:HG23	1:A:15:THR:HG22	1	0.01	0.01
(1,560)	1:A:13:THR:HG23	1:A:15:THR:HG23	1	0.01	0.01
(1,555)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:134:MET:HG2	1	0.01	0.01
(1,555)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:134:MET:HG3	1	0.01	0.01
(1,555)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:134:MET:HG2	1	0.01	0.01
(1,555)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:134:MET:HG3	1	0.01	0.01
(1,555)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:134:MET:HG2	1	0.01	0.01
(1,555)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:134:MET:HG3	1	0.01	0.01
(1,52)	1:A:11:LEU:HA	1:A:12:ASN:H	1	0.01	0.01
(1,492)	1:A:59:GLN:HA	1:A:64:ALA:HB1	1	0.01	0.01
(1,492)	1:A:59:GLN:HA	1:A:64:ALA:HB2	1	0.01	0.01
(1,492)	1:A:59:GLN:HA	1:A:64:ALA:HB3	1	0.01	0.01
(1,49)	1:A:137:GLY:H	1:A:138:ARG:H	1	0.11	0.11
(1,485)	1:A:53:THR:HA	1:A:107:GLN:HG2	1	0.03	0.03
(1,485)	1:A:53:THR:HA	1:A:107:GLN:HG3	1	0.03	0.03
(1,482)	1:A:52:ILE:HA	1:A:56:LEU:HD11	1	0.01	0.01
(1,482)	1:A:52:ILE:HA	1:A:56:LEU:HD12	1	0.01	0.01
(1,482)	1:A:52:ILE:HA	1:A:56:LEU:HD13	1	0.01	0.01
(1,444)	1:A:14:VAL:HA	1:A:24:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,444)	1:A:14:VAL:HA	1:A:24:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,444)	1:A:14:VAL:HA	1:A:24:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,439)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:37:PRO:HA	1	0.03	0.03
(1,439)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:37:PRO:HA	1	0.03	0.03
(1,434)	1:A:129:THR:H	1:A:132:ILE:HD11	1	0.01	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,434)	1:A:129:THR:H	1:A:132:ILE:HD12	1	0.01	0.01
(1,434)	1:A:129:THR:H	1:A:132:ILE:HD13	1	0.01	0.01
(1,429)	1:A:97:GLY:H	1:A:123:THR:HG21	1	0.01	0.01
(1,429)	1:A:97:GLY:H	1:A:123:THR:HG22	1	0.01	0.01
(1,429)	1:A:97:GLY:H	1:A:123:THR:HG23	1	0.01	0.01
(1,412)	1:A:53:THR:H	1:A:56:LEU:HB2	1	0.01	0.01
(1,400)	1:A:14:VAL:H	1:A:134:MET:HE1	1	0.01	0.01
(1,400)	1:A:14:VAL:H	1:A:134:MET:HE2	1	0.01	0.01
(1,400)	1:A:14:VAL:H	1:A:134:MET:HE3	1	0.01	0.01
(1,396)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:118:VAL:H	1	0.01	0.01
(1,396)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:118:VAL:H	1	0.01	0.01
(1,396)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:118:VAL:H	1	0.01	0.01
(1,379)	1:A:58:GLN:HG2	1:A:111:LEU:H	1	0.01	0.01
(1,379)	1:A:58:GLN:HG3	1:A:111:LEU:H	1	0.01	0.01
(1,374)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:140:VAL:H	1	0.02	0.02
(1,374)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:140:VAL:H	1	0.02	0.02
(1,374)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:140:VAL:H	1	0.02	0.02
(1,35)	1:A:115:GLY:H	1:A:116:VAL:H	1	0.02	0.02
(1,320)	1:A:109:ARG:HA	1:A:112:LEU:HD11	1	0.04	0.04
(1,320)	1:A:109:ARG:HA	1:A:112:LEU:HD12	1	0.04	0.04
(1,320)	1:A:109:ARG:HA	1:A:112:LEU:HD13	1	0.04	0.04
(1,317)	1:A:105:PRO:HA	1:A:108:VAL:HG21	1	0.02	0.02
(1,317)	1:A:105:PRO:HA	1:A:108:VAL:HG22	1	0.02	0.02
(1,317)	1:A:105:PRO:HA	1:A:108:VAL:HG23	1	0.02	0.02
(1,299)	1:A:106:GLU:HA	1:A:109:ARG:HB2	1	0.01	0.01
(1,299)	1:A:106:GLU:HA	1:A:109:ARG:HB3	1	0.01	0.01
(1,276)	1:A:96:THR:HB	1:A:98:ARG:H	1	0.02	0.02
(1,244)	1:A:121:MET:HE1	1:A:122:ASP:H	1	0.05	0.05
(1,244)	1:A:121:MET:HE2	1:A:122:ASP:H	1	0.05	0.05
(1,244)	1:A:121:MET:HE3	1:A:122:ASP:H	1	0.05	0.05
(1,218)	1:A:53:THR:HG21	1:A:54:ALA:H	1	0.03	0.03
(1,218)	1:A:53:THR:HG22	1:A:54:ALA:H	1	0.03	0.03
(1,218)	1:A:53:THR:HG23	1:A:54:ALA:H	1	0.03	0.03
(1,203)	1:A:23:GLU:HG3	1:A:24:VAL:H	1	0.03	0.03
(1,2)	1:A:18:GLY:H	1:A:19:ASP:H	1	0.01	0.01
(1,1118)	1:A:141:VAL:O	1:A:93:LEU:N	1	0.02	0.02
(1,1112)	1:A:130:TYR:O	1:A:134:MET:N	1	0.01	0.01
(1,1103)	1:A:125:ALA:O	1:A:129:THR:H	1	0.01	0.01
(1,1094)	1:A:121:MET:O	1:A:96:THR:N	1	0.01	0.01
(1,1080)	1:A:90:GLU:O	1:A:117:GLY:N	1	0.01	0.01
(1,108)	1:A:49:PRO:HA	1:A:52:ILE:H	1	0.02	0.02
(1,1073)	1:A:54:ALA:O	1:A:58:GLN:H	1	0.01	0.01



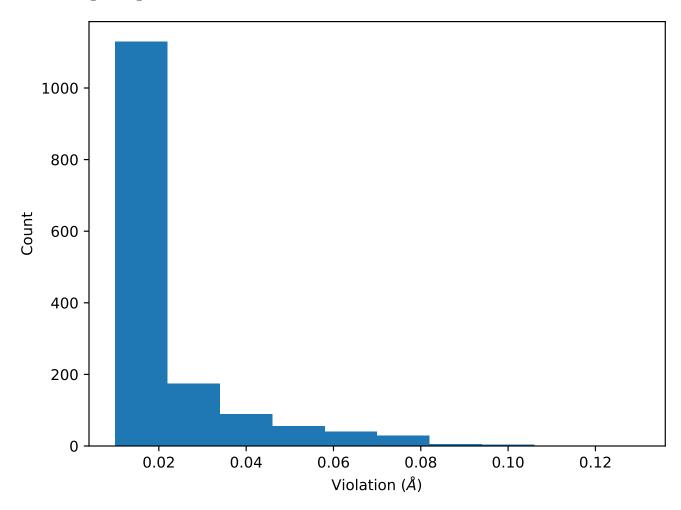
Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1071)	1:A:53:THR:O	1:A:57:LEU:H	1	0.01	0.01
(1,1062)	1:A:33:ILE:O	1:A:144:LEU:N	1	0.01	0.01
(1,105)	1:A:86:ALA:HA	1:A:88:ALA:H	1	0.02	0.02
(1,101)	1:A:19:ASP:HA	1:A:21:TYR:H	1	0.04	0.04

## 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)
(1,69)	1:A:38:GLU:HA	1:A:39:GLY:H	14	0.13
(1,49)	1:A:137:GLY:H	1:A:138:ARG:H	19	0.11
(1,905)	1:A:19:ASP:H	1:A:19:ASP:HB3	1	0.1
(1,905)	1:A:19:ASP:H	1:A:19:ASP:HB3	12	0.1
(1,1044)	1:A:138:ARG:H	1:A:138:ARG:HB3	13	0.1
(1,69)	1:A:38:GLU:HA	1:A:39:GLY:H	6	0.09
(1,107)	1:A:147:ASP:HA	1:A:149:ASP:H	1	0.09
(1,1044)	1:A:138:ARG:H	1:A:138:ARG:HB3	3	0.09
(1,1044)	1:A:138:ARG:H	1:A:138:ARG:HB3	12	0.09
(1,1044)	1:A:138:ARG:H	1:A:138:ARG:HB3	14	0.09
(1,991)	1:A:109:ARG:H	1:A:109:ARG:HB3	2	0.08
(1,991)	1:A:109:ARG:H	1:A:109:ARG:HB3	3	0.08
(1,991)	1:A:109:ARG:H	1:A:109:ARG:HB3	5	0.08
(1,991)	1:A:109:ARG:H	1:A:109:ARG:HB3	7	0.08
(1,991)	1:A:109:ARG:H	1:A:109:ARG:HB3	15	0.08
(1,905)	1:A:19:ASP:H	1:A:19:ASP:HB3	5	0.08
(1,905)	1:A:19:ASP:H	1:A:19:ASP:HB3	6	0.08
(1,905)	1:A:19:ASP:H	1:A:19:ASP:HB3	9	0.08
(1,905)	1:A:19:ASP:H	1:A:19:ASP:HB3	13	0.08
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD21	6	0.08
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD22	6	0.08
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD23	6	0.08
(1,221)	1:A:63:LEU:HD11	1:A:64:ALA:H	6	0.08
(1,221)	1:A:63:LEU:HD12	1:A:64:ALA:H	6	0.08
(1,221)	1:A:63:LEU:HD13	1:A:64:ALA:H	6	0.08
(1,1117)	1:A:139:ARG:O	1:A:91:VAL:H	11	0.08
(1,1044)	1:A:138:ARG:H	1:A:138:ARG:HB3	6	0.08
(1,1044)	1:A:138:ARG:H	1:A:138:ARG:HB3	10	0.08
(1,1044)	1:A:138:ARG:H	1:A:138:ARG:HB3	15	0.08
(1,977)	1:A:100:GLN:H	1:A:100:GLN:HB3	6	0.07
(1,977)	1:A:100:GLN:H	1:A:100:GLN:HB3	8	0.07
(1,977)	1:A:100:GLN:H	1:A:100:GLN:HB3	17	0.07
(1,905)	1:A:19:ASP:H	1:A:19:ASP:HB3	11	0.07
(1,449)	1:A:17:TYR:HB2	1:A:22:ILE:HA	1	0.07
(1,449)	1:A:17:TYR:HB3	1:A:22:ILE:HA	1	0.07
(1,221)	1:A:63:LEU:HD11	1:A:64:ALA:H	5	0.07
(1,221)	1:A:63:LEU:HD12	1:A:64:ALA:H	5	0.07
(1,221)	1:A:63:LEU:HD13	1:A:64:ALA:H	5	0.07
(1,991)	1:A:109:ARG:H	1:A:109:ARG:HB3	16	0.06
(1,977)	1:A:100:GLN:H	1:A:100:GLN:HB3	1	0.06
(1,977)	1:A:100:GLN:H	1:A:100:GLN:HB3	7	0.06
(1,977)	1:A:100:GLN:H	1:A:100:GLN:HB3	10	0.06
(1,977)	1:A:100:GLN:H	1:A:100:GLN:HB3	14	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,977)	1:A:100:GLN:H	1:A:100:GLN:HB3	15	0.06
(1,95)	1:A:139:ARG:HA	1:A:140:VAL:H	19	0.06
(1,905)	1:A:19:ASP:H	1:A:19:ASP:HB3	15	0.06
(1,905)	1:A:19:ASP:H	1:A:19:ASP:HB3	18	0.06
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD21	16	0.06
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD22	16	0.06
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD23	16	0.06
(1,715)	1:A:53:THR:HG21	1:A:55:SER:HG	19	0.06
(1,715)	1:A:53:THR:HG22	1:A:55:SER:HG	19	0.06
(1,715)	1:A:53:THR:HG23	1:A:55:SER:HG	19	0.06
(1,690)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:145:LEU:HD21	11	0.06
(1,690)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:145:LEU:HD22	11	0.06
(1,690)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:145:LEU:HD23	11	0.06
(1,690)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:145:LEU:HD21	11	0.06
(1,690)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:145:LEU:HD22	11	0.06
(1,690)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:145:LEU:HD23	11	0.06
(1,690)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:145:LEU:HD21	11	0.06
(1,690)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:145:LEU:HD22	11	0.06
(1,690)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:145:LEU:HD23	11	0.06
(1,663)	1:A:44:TRP:HH2	1:A:46:VAL:HG11	18	0.06
(1,663)	1:A:44:TRP:HH2	1:A:46:VAL:HG12	18	0.06
(1,663)	1:A:44:TRP:HH2	1:A:46:VAL:HG13	18	0.06
(1,650)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:38:GLU:HG2	11	0.06
(1,650)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:38:GLU:HG3	11	0.06
(1,650)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:38:GLU:HG2	11	0.06
(1,650)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:38:GLU:HG3	11	0.06
(1,650)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:38:GLU:HG2	11	0.06
(1,650)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:38:GLU:HG3	11	0.06
(1,357)	1:A:23:GLU:HA	1:A:28:ARG:HA	10	0.06
(1,340)	1:A:33:ILE:HA	1:A:42:ALA:H	19	0.06
(1,1117)	1:A:139:ARG:O	1:A:91:VAL:H	6	0.06
(1,1117)	1:A:139:ARG:O	1:A:91:VAL:H	9	0.06
(1,1117)	1:A:139:ARG:O	1:A:91:VAL:H	10	0.06
(1,107)	1:A:147:ASP:HA	1:A:149:ASP:H	3	0.06
(1,1044)	1:A:138:ARG:H	1:A:138:ARG:HB3	19	0.06
(1,905)	1:A:19:ASP:H	1:A:19:ASP:HB3	3	0.05
(1,905)	1:A:19:ASP:H	1:A:19:ASP:HB3	19	0.05
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD21	9	0.05
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD22	9	0.05
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD23	9	0.05
(1,816)	1:A:100:GLN:HG2	1:A:120:ALA:HB1	14	0.05
(1,816)	1:A:100:GLN:HG2	1:A:120:ALA:HB2	14	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,816)	1:A:100:GLN:HG2	1:A:120:ALA:HB3	14	0.05
(1,816)	1:A:100:GLN:HG3	1:A:120:ALA:HB1	14	0.05
(1,816)	1:A:100:GLN:HG3	1:A:120:ALA:HB2	14	0.05
(1,816)	1:A:100:GLN:HG3	1:A:120:ALA:HB3	14	0.05
(1,813)	1:A:96:THR:HG21	1:A:103:LEU:HD21	15	0.05
(1,813)	1:A:96:THR:HG21	1:A:103:LEU:HD22	15	0.05
(1,813)	1:A:96:THR:HG21	1:A:103:LEU:HD23	15	0.05
(1,813)	1:A:96:THR:HG22	1:A:103:LEU:HD21	15	0.05
(1,813)	1:A:96:THR:HG22	1:A:103:LEU:HD22	15	0.05
(1,813)	1:A:96:THR:HG22	1:A:103:LEU:HD23	15	0.05
(1,813)	1:A:96:THR:HG23	1:A:103:LEU:HD21	15	0.05
(1,813)	1:A:96:THR:HG23	1:A:103:LEU:HD22	15	0.05
(1,813)	1:A:96:THR:HG23	1:A:103:LEU:HD23	15	0.05
(1,715)	1:A:53:THR:HG21	1:A:55:SER:HG	2	0.05
(1,715)	1:A:53:THR:HG22	1:A:55:SER:HG	2	0.05
(1,715)	1:A:53:THR:HG23	1:A:55:SER:HG	2	0.05
(1,690)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:145:LEU:HD21	20	0.05
(1,690)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:145:LEU:HD22	20	0.05
(1,690)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:145:LEU:HD23	20	0.05
(1,690)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:145:LEU:HD21	20	0.05
(1,690)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:145:LEU:HD22	20	0.05
(1,690)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:145:LEU:HD23	20	0.05
(1,690)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:145:LEU:HD21	20	0.05
(1,690)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:145:LEU:HD22	20	0.05
(1,690)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:145:LEU:HD23	20	0.05
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG21	18	0.05
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG22	18	0.05
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG23	18	0.05
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG21	18	0.05
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG22	18	0.05
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG23	18	0.05
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG21	18	0.05
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG22	18	0.05
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG23	18	0.05
(1,617)	1:A:31:HIS:HE1	1:A:33:ILE:HG21	5	0.05
(1,617)	1:A:31:HIS:HE1	1:A:33:ILE:HG22	5	0.05
(1,617)	1:A:31:HIS:HE1	1:A:33:ILE:HG23	5	0.05
(1,57)	1:A:19:ASP:HA	1:A:20:GLY:H	11	0.05
(1,478)	1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD11	19	0.05
(1,478)	1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD12	19	0.05
(1,478)	1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD13	19	0.05
(1,244)	1:A:121:MET:HE1	1:A:122:ASP:H	3	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,244)	1:A:121:MET:HE2	1:A:122:ASP:H	3	0.05
(1,244)	1:A:121:MET:HE3	1:A:122:ASP:H	3	0.05
(1,1125)	1:A:144:LEU:O	1:A:33:ILE:H	3	0.05
(1,1117)	1:A:139:ARG:O	1:A:91:VAL:H	8	0.05
(1,1117)	1:A:139:ARG:O	1:A:91:VAL:H	17	0.05
(1,100)	1:A:147:ASP:HA	1:A:148:GLY:H	20	0.05
(1,991)	1:A:109:ARG:H	1:A:109:ARG:HB3	11	0.04
(1,859)	1:A:124:GLN:HG2	1:A:128:ARG:HB2	2	0.04
(1,859)	1:A:124:GLN:HG2	1:A:128:ARG:HB3	2	0.04
(1,859)	1:A:124:GLN:HG3	1:A:128:ARG:HB2	2	0.04
(1,859)	1:A:124:GLN:HG3	1:A:128:ARG:HB3	2	0.04
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD21	5	0.04
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD22	5	0.04
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD23	5	0.04
(1,811)	1:A:96:THR:HB	1:A:101:HIS:HB2	20	0.04
(1,811)	1:A:96:THR:HB	1:A:101:HIS:HB3	20	0.04
(1,750)	1:A:63:LEU:HB2	1:A:88:ALA:HB1	17	0.04
(1,750)	1:A:63:LEU:HB2	1:A:88:ALA:HB2	17	0.04
(1,750)	1:A:63:LEU:HB2	1:A:88:ALA:HB3	17	0.04
(1,750)	1:A:63:LEU:HB3	1:A:88:ALA:HB1	17	0.04
(1,750)	1:A:63:LEU:HB3	1:A:88:ALA:HB2	17	0.04
(1,750)	1:A:63:LEU:HB3	1:A:88:ALA:HB3	17	0.04
(1,739)	1:A:61:ALA:HB1	1:A:114:MET:HE1	12	0.04
(1,739)	1:A:61:ALA:HB1	1:A:114:MET:HE2	12	0.04
(1,739)	1:A:61:ALA:HB1	1:A:114:MET:HE3	12	0.04
(1,739)	1:A:61:ALA:HB2	1:A:114:MET:HE1	12	0.04
(1,739)	1:A:61:ALA:HB2	1:A:114:MET:HE2	12	0.04
(1,739)	1:A:61:ALA:HB2	1:A:114:MET:HE3	12	0.04
(1,739)	1:A:61:ALA:HB3	1:A:114:MET:HE1	12	0.04
(1,739)	1:A:61:ALA:HB3	1:A:114:MET:HE2	12	0.04
(1,739)	1:A:61:ALA:HB3	1:A:114:MET:HE3	12	0.04
(1,704)	1:A:52:ILE:HB	1:A:56:LEU:HD11	12	0.04
(1,704)	1:A:52:ILE:HB	1:A:56:LEU:HD12	12	0.04
(1,704)	1:A:52:ILE:HB	1:A:56:LEU:HD13	12	0.04
(1,704)	1:A:52:ILE:HB	1:A:56:LEU:HD11	16	0.04
(1,704)	1:A:52:ILE:HB	1:A:56:LEU:HD12	16	0.04
(1,704)	1:A:52:ILE:HB	1:A:56:LEU:HD13	16	0.04
(1,698)	1:A:49:PRO:HB2	1:A:101:HIS:HB2	8	0.04
(1,698)	1:A:49:PRO:HB2	1:A:101:HIS:HB3	8	0.04
(1,698)	1:A:49:PRO:HB3	1:A:101:HIS:HB2	8	0.04
(1,698)	1:A:49:PRO:HB3	1:A:101:HIS:HB3	8	0.04
(1,695)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:56:LEU:HD11	19	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,695)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:56:LEU:HD12	19	0.04
(1,695)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:56:LEU:HD13	19	0.04
(1,695)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:56:LEU:HD11	19	0.04
(1,695)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:56:LEU:HD12	19	0.04
(1,695)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:56:LEU:HD13	19	0.04
(1,695)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:56:LEU:HD11	19	0.04
(1,695)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:56:LEU:HD12	19	0.04
(1,695)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:56:LEU:HD13	19	0.04
(1,69)	1:A:38:GLU:HA	1:A:39:GLY:H	11	0.04
(1,686)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:51:ASP:HB2	2	0.04
(1,686)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:51:ASP:HB2	2	0.04
(1,686)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:51:ASP:HB2	2	0.04
(1,686)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:51:ASP:HB2	3	0.04
(1,686)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:51:ASP:HB2	3	0.04
(1,686)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:51:ASP:HB2	3	0.04
(1,686)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:51:ASP:HB2	6	0.04
(1,686)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:51:ASP:HB2	6	0.04
(1,686)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:51:ASP:HB2	6	0.04
(1,663)	1:A:44:TRP:HH2	1:A:46:VAL:HG11	6	0.04
(1,663)	1:A:44:TRP:HH2	1:A:46:VAL:HG12	6	0.04
(1,663)	1:A:44:TRP:HH2	1:A:46:VAL:HG13	6	0.04
(1,617)	1:A:31:HIS:HE1	1:A:33:ILE:HG21	20	0.04
(1,617)	1:A:31:HIS:HE1	1:A:33:ILE:HG22	20	0.04
(1,617)	1:A:31:HIS:HE1	1:A:33:ILE:HG23	20	0.04
(1,57)	1:A:19:ASP:HA	1:A:20:GLY:H	15	0.04
(1,57)	1:A:19:ASP:HA	1:A:20:GLY:H	20	0.04
(1,499)	1:A:89:PRO:HA	1:A:139:ARG:HG2	18	0.04
(1,499)	1:A:89:PRO:HA	1:A:139:ARG:HG3	18	0.04
(1,415)	1:A:88:ALA:H	1:A:116:VAL:HG21	12	0.04
(1,415)	1:A:88:ALA:H	1:A:116:VAL:HG22	12	0.04
(1,415)	1:A:88:ALA:H	1:A:116:VAL:HG23	12	0.04
(1,340)	1:A:33:ILE:HA	1:A:42:ALA:H	6	0.04
(1,340)	1:A:33:ILE:HA	1:A:42:ALA:H	12	0.04
(1,340)	1:A:33:ILE:HA	1:A:42:ALA:H	17	0.04
(1,320)	1:A:109:ARG:HA	1:A:112:LEU:HD11	6	0.04
(1,320)	1:A:109:ARG:HA	1:A:112:LEU:HD12	6	0.04
(1,320)	1:A:109:ARG:HA	1:A:112:LEU:HD13	6	0.04
(1,23)	1:A:86:ALA:H	1:A:87:ASN:H	8	0.04
(1,221)	1:A:63:LEU:HD11	1:A:64:ALA:H	11	0.04
(1,221)	1:A:63:LEU:HD12	1:A:64:ALA:H	11	0.04
(1,221)	1:A:63:LEU:HD13	1:A:64:ALA:H	11	0.04
(1,13)	1:A:51:ASP:H	1:A:52:ILE:H	17	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1125)	1:A:144:LEU:O	1:A:33:ILE:H	5	0.04
(1,1117)	1:A:139:ARG:O	1:A:91:VAL:H	5	0.04
(1,1117)	1:A:139:ARG:O	1:A:91:VAL:H	7	0.04
(1,1117)	1:A:139:ARG:O	1:A:91:VAL:H	12	0.04
(1,1117)	1:A:139:ARG:O	1:A:91:VAL:H	18	0.04
(1,1116)	1:A:139:ARG:O	1:A:91:VAL:N	11	0.04
(1,1109)	1:A:128:ARG:O	1:A:132:ILE:H	7	0.04
(1,1109)	1:A:128:ARG:O	1:A:132:ILE:H	19	0.04
(1,1075)	1:A:55:SER:O	1:A:59:GLN:H	19	0.04
(1,101)	1:A:19:ASP:HA	1:A:21:TYR:H	6	0.04
(1,955)	1:A:58:GLN:HB2	1:A:58:GLN:HE21	19	0.03
(1,955)	1:A:58:GLN:HB2	1:A:58:GLN:HE22	19	0.03
(1,955)	1:A:58:GLN:HB3	1:A:58:GLN:HE21	19	0.03
(1,955)	1:A:58:GLN:HB3	1:A:58:GLN:HE22	19	0.03
(1,93)	1:A:136:GLU:HA	1:A:137:GLY:H	2	0.03
(1,905)	1:A:19:ASP:H	1:A:19:ASP:HB3	20	0.03
(1,835)	1:A:111:LEU:HD11	1:A:114:MET:HE1	15	0.03
(1,835)	1:A:111:LEU:HD11	1:A:114:MET:HE2	15	0.03
(1,835)	1:A:111:LEU:HD11	1:A:114:MET:HE3	15	0.03
(1,835)	1:A:111:LEU:HD12	1:A:114:MET:HE1	15	0.03
(1,835)	1:A:111:LEU:HD12	1:A:114:MET:HE2	15	0.03
(1,835)	1:A:111:LEU:HD12	1:A:114:MET:HE3	15	0.03
(1,835)	1:A:111:LEU:HD13	1:A:114:MET:HE1	15	0.03
(1,835)	1:A:111:LEU:HD13	1:A:114:MET:HE2	15	0.03
(1,835)	1:A:111:LEU:HD13	1:A:114:MET:HE3	15	0.03
(1,828)	1:A:105:PRO:HB2	1:A:109:ARG:HB2	3	0.03
(1,828)	1:A:105:PRO:HB2	1:A:109:ARG:HB3	3	0.03
(1,828)	1:A:105:PRO:HB3	1:A:109:ARG:HB2	3	0.03
(1,828)	1:A:105:PRO:HB3	1:A:109:ARG:HB3	3	0.03
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD21	20	0.03
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD22	20	0.03
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD23	20	0.03
(1,778)	1:A:92:LEU:HD11	1:A:116:VAL:HG21	12	0.03
(1,778)	1:A:92:LEU:HD11	1:A:116:VAL:HG22	12	0.03
(1,778)	1:A:92:LEU:HD11	1:A:116:VAL:HG23	12	0.03
(1,778)	1:A:92:LEU:HD12	1:A:116:VAL:HG21	12	0.03
(1,778)	1:A:92:LEU:HD12	1:A:116:VAL:HG22	12	0.03
(1,778)	1:A:92:LEU:HD12	1:A:116:VAL:HG23	12	0.03
(1,778)	1:A:92:LEU:HD13	1:A:116:VAL:HG21	12	0.03
(1,778)	1:A:92:LEU:HD13	1:A:116:VAL:HG22	12	0.03
(1,778)	1:A:92:LEU:HD13	1:A:116:VAL:HG23	12	0.03
(1,768)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:119:GLU:HG2	18	0.03



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

(1,768) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:119:GLU:HG3 18 0.03 (1,768) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:119:GLU:HG2 18 0.03 (1,768) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:119:GLU:HG3 18 0.03 (1,768) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:119:GLU:HG3 18 0.03 (1,768) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:119:GLU:HG3 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG21 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG22 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG22 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG23 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG22 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG22 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG22 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG23 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG21 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG21 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG22 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG23 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG23 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG21 18 0.03 (1,761) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB1 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB1 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB1 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB3 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,768) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:119:GLU:HG2 18 0.03 (1,768) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:119:GLU:HG2 18 0.03 (1,761) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:119:GLU:HG3 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG21 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG22 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG23 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG23 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG21 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG21 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG21 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG22 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG22 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG22 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG21 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG22 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG23 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG23 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG21 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG21 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG21 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG22 18 0.03 (1,761) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB1 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB1 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB1 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB3 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A	(1,768)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:119:GLU:HG3	18	0.03
(1,768) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:119:GLU:HG2 18 0.03 (1,768) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:119:GLU:HG3 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG21 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG22 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG23 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG23 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG21 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG21 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG23 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG23 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG23 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG23 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG21 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG23 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG23 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:141:VAL:HG23 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB1 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB2 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB2 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB3 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB3 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB1 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB3 18 0.03 (1,713) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:111:LEU:HD11 9 0.03 (1,722) 1:A:57:LEU:HB3 1:A:15	(1,768)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:119:GLU:HG2	18	0.03
(1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG21 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG22 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG22 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG22 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG23 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG21 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG23 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG23 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG21 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG23 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB2 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB2 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB1 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB2 19 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB3 19 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:111:LEU:HD11 9 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:111:LEU:HD11 9 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:111:LEU:HD11 9 0.03 (1,713) 1:A:55:LEU:HB3 1:A:111:LEU:HD11 19 0.03 (1,713) 1:A:55:LEU:HB3 1:A:111:LEU:HD11 19 0.03 (1,713) 1:A:55:LEU:HB3 1:A:111:LEU:HD11 19 0.03 (1,713) 1:A:55:LE:HG21 1:A:56:LEU:HD23 14 0.03 (1,713) 1:A:52:LE:HG	(1,768)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:119:GLU:HG3	18	0.03
(1,761)         1:A:89:PRO:HB2         1:A:141:VAL:HG21         17         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB2         1:A:141:VAL:HG22         17         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB2         1:A:141:VAL:HG23         17         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB3         1:A:141:VAL:HG21         17         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB3         1:A:141:VAL:HG22         17         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB3         1:A:141:VAL:HG23         17         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB2         1:A:141:VAL:HG21         18         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB2         1:A:141:VAL:HG22         18         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB3         1:A:141:VAL:HG21         18         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB3         1:A:141:VAL:HG23         18         0.03           (1,761)         1:A:63:LEU:HB2	(1,768)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:119:GLU:HG2	18	0.03
(1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG22 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG23 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG21 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG22 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG22 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG23 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG23 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG21 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG21 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG21 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG22 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG22 18 0.03 (1,761) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB2 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB1 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB2 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB3 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB3 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB3 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB1 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB2 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB2 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB3 18 0.03 (1,751) 1:A:57:LEU:HB2 1:A:111:LEU:HD11 9 0.03 (1,722) 1:A:57:LEU:HB2 1:A:111:LEU:HD11 9 0.03 (1,722) 1:A:57:LEU:HB3 1:A:111:LEU:HD11 9 0.03 (1,722) 1:A:57:LEU:HB3 1:A:111:LEU:HD11 9 0.03 (1,715) 1:A:53:THR:HG21 1:A:55:SER:HG 1 0.03 (1,715) 1:A:53:THR:HG21 1:A:55:SER:HG 1 0.03 (1,715) 1:A:53:THR:HG22 1:A:55:SER:HG 1 0.03 (1,713) 1:A:52:ILE:HG22 1:A:56:LEU:HD22 14 0.03 (1,713) 1:A:52:ILE:HG22 1:A:56:LEU:HD23 14 0.03 (1,713) 1:A:52:ILE:HG22 1:A:56:LEU:HD23 14 0.03 (1,713) 1:A:52:ILE:HG22 1:A:56:LEU:HD23 14 0.03 (1,713) 1:A:52:ILE:HG22 1:A:56:LEU:HD22 14 0.03 (1,713) 1:A:52:ILE:HG22 1:A:56:LEU:HD22 14 0.03 (1,713) 1:A:52:ILE:HG23 1	(1,768)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:119:GLU:HG3	18	0.03
(1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG23 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG21 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG22 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG22 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG23 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG21 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG22 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG22 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG23 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG21 18 0.03 (1,761) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB2 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB1 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB2 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB3 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB2 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB3 19	(1,761)	1:A:89:PRO:HB2	1:A:141:VAL:HG21	17	0.03
(1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG21 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG22 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG23 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG21 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG21 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG22 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG22 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG21 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG22 18 0.03 (1,761) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB1 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB1 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB2 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB3 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB1 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB3 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB2 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB3 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB3 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB3 18 0.03 (1,751) 1:A:57:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB3 18 0.03 (1,751) 1:A:57:LEU:HB3 1:A:111:LEU:HD11 9 0.03 (1,722) 1:A:57:LEU:HB2 1:A:111:LEU:HD11 9 0.03 (1,722) 1:A:57:LEU:HB3 1:A:111:LEU:HD12 9 0.03 (1,722) 1:A:57:LEU:HB3 1:A:111:LEU:HD11 9 0.03 (1,722) 1:A:57:LEU:HB3 1:A:111:LEU:HD11 9 0.03 (1,715) 1:A:53:THR:HG21 1:A:55:SER:HG 1 0.03 (1,715) 1:A:53:THR:HG21 1:A:55:SER:HG 1 0.03 (1,713) 1:A:52:ILE:HG21 1:A:56:LEU:HD21 14 0.03 (1,713) 1:A:52:ILE:HG21 1:A:56:LEU:HD21 14 0.03 (1,713) 1:A:52:ILE:HG21 1:A:56:LEU:HD21 14 0.03 (1,713) 1:A:52:ILE:HG22 1:A:56:LEU:HD22 14 0.03 (1,713) 1:A:52:ILE:HG23	(1,761)	1:A:89:PRO:HB2	1:A:141:VAL:HG22	17	0.03
(1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG22 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG23 17 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG21 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG22 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB2 1:A:141:VAL:HG22 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG23 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG21 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG21 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG22 18 0.03 (1,761) 1:A:89:PRO:HB3 1:A:141:VAL:HG22 18 0.03 (1,760) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB1 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB1 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB2 1:A:88:ALA:HB3 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB3 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB1 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB2 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB2 18 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB2 19 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:88:ALA:HB3 19 0.03 (1,750) 1:A:63:LEU:HB3 1:A:111:LEU:HD11 9 0.03 (1,722) 1:A:57:LEU:HB2 1:A:111:LEU:HD11 9 0.03 (1,722) 1:A:57:LEU:HB3 1:A:111:LEU:HD11 9 0.03 (1,722) 1:A:57:LEU:HB3 1:A:111:LEU:HD13 9 0.03 (1,722) 1:A:57:LEU:HB3 1:A:111:LEU:HD14 9 0.03 (1,722) 1:A:57:LEU:HB3 1:A:111:LEU:HD14 9 0.03 (1,715) 1:A:53:THR:HG21 1:A:55:SER:HG 1 0.03 (1,715) 1:A:53:THR:HG21 1:A:55:SER:HG 1 0.03 (1,715) 1:A:53:THR:HG21 1:A:55:SER:HG 1 0.03 (1,713) 1:A:52:ILE:HG21 1:A:56:LEU:HD21 14 0.03 (1,713) 1:A:52:ILE:HG21 1:A:56:LEU:HD21 14 0.03 (1,713) 1:A:52:ILE:HG22 1:A:56:LEU:HD22 14 0.03 (1,713) 1:A:52:ILE:HG22 1:A:56:LEU:HD23 14 0.03 (1,713) 1:A:52:ILE:HG22 1:A:56:LEU:HD22 14 0.03 (1,713) 1:A:52:ILE:HG23 1:A:56:LEU:HD22 14 0.03 (1,713) 1:A:52:ILE:HG23 1:A:56:LEU:HD22 14 0.03 (1,713) 1:A:52:ILE:HG23 1:A:56:LEU:HD22 14 0.03 (1,713) 1:A:52:ILE:HG23 1:A:56:LEU:HD22 14 0.03	(1,761)	1:A:89:PRO:HB2	1:A:141:VAL:HG23	17	0.03
(1,761)         1:A:89:PRO:HB3         1:A:141:VAL:HG23         17         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB2         1:A:141:VAL:HG21         18         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB2         1:A:141:VAL:HG22         18         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB3         1:A:141:VAL:HG23         18         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB3         1:A:141:VAL:HG22         18         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB3         1:A:141:VAL:HG23         18         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB3         1:A:141:VAL:HG23         18         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB3         1:A:41:VAL:HG23         18         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB3         1:A:41:VAL:HG23         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB2         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,750)         1:A:63:TLEU:HB3 <td< td=""><td>(1,761)</td><td>1:A:89:PRO:HB3</td><td>1:A:141:VAL:HG21</td><td>17</td><td>0.03</td></td<>	(1,761)	1:A:89:PRO:HB3	1:A:141:VAL:HG21	17	0.03
(1,761)         1:A:89:PRO:HB2         1:A:141:VAL:HG21         18         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB2         1:A:141:VAL:HG22         18         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB2         1:A:141:VAL:HG23         18         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB3         1:A:141:VAL:HG21         18         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB3         1:A:141:VAL:HG22         18         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB3         1:A:141:VAL:HG23         18         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB3         1:A:141:VAL:HG23         18         0.03           (1,761)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB1         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB1         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB2         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,750)         1:A:63:FLEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,752)         1:A:67:EU:HB3         1:	(1,761)	1:A:89:PRO:HB3	1:A:141:VAL:HG22	17	0.03
(1,761)         1:A:89:PRO:HB2         1:A:141:VAL:HG22         18         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB2         1:A:141:VAL:HG23         18         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB3         1:A:141:VAL:HG21         18         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB3         1:A:141:VAL:HG22         18         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB3         1:A:141:VAL:HG23         18         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB3         1:A:141:VAL:HG23         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB1         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB1         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB2         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB2         1:A:	(1,761)	1:A:89:PRO:HB3	1:A:141:VAL:HG23	17	0.03
(1,761)         1:A:89:PRO:HB2         1:A:141:VAL:HG23         18         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB3         1:A:141:VAL:HG21         18         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB3         1:A:141:VAL:HG22         18         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB3         1:A:141:VAL:HG23         18         0.03           (1,761)         1:A:69:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB1         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB2         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB1         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB2         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB2         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB2         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:48:ALA:HB2         19         0.03           (1,752)         1:A:57:LEU:HB2         1:A:111:	(1,761)	1:A:89:PRO:HB2	1:A:141:VAL:HG21	18	0.03
(1,761)         1:A:89:PRO:HB3         1:A:141:VAL:HG21         18         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB3         1:A:141:VAL:HG22         18         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB3         1:A:141:VAL:HG23         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB1         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB1         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB2         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,751)         1:A:87:ASN:HA         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB2         1:A:111:LEU:HD11         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LE	(1,761)	1:A:89:PRO:HB2	1:A:141:VAL:HG22	18	0.03
(1,761)         1:A:89:PRO:HB3         1:A:141:VAL:HG22         18         0.03           (1,761)         1:A:89:PRO:HB3         1:A:141:VAL:HG23         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB1         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB2         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB1         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB2         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,751)         1:A:87:ASN:HA         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,752)         1:A:57:LEU:HB2         1:A:111:LEU:HD11         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB2         1:A:111:LEU:HD13         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU	(1,761)	1:A:89:PRO:HB2	1:A:141:VAL:HG23	18	0.03
(1,761)         1:A:89:PRO:HB3         1:A:141:VAL:HG23         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB1         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB2         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB1         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB2         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB2         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD11         9         0.03           (1,752)         1:A:57:LEU:HB2         1:A:111:LEU:HD12         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD13         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD13         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LE	(1,761)	1:A:89:PRO:HB3	1:A:141:VAL:HG21	18	0.03
(1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB1         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB2         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB1         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB2         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,751)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,752)         1:A:57:LEU:HB2         1:A:111:LEU:HD11         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB2         1:A:111:LEU:HD13         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD13         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD13         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD13         9         0.03           (1,715)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:511:LEU	(1,761)	1:A:89:PRO:HB3	1:A:141:VAL:HG22	18	0.03
(1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB2         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB1         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB2         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,751)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD11         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB2         1:A:111:LEU:HD13         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD11         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD11         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD11         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU	(1,761)	1:A:89:PRO:HB3	1:A:141:VAL:HG23	18	0.03
(1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB2         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB2         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB1         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB2         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,751)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,722)         1:A:67:LEU:HB2         1:A:111:LEU:HD11         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB2         1:A:111:LEU:HD12         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD11         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD12         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD11         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD12         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LE	(1,750)	1:A:63:LEU:HB2	1:A:88:ALA:HB1	18	0.03
(1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB1         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB2         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,75)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB2         1:A:111:LEU:HD11         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB2         1:A:111:LEU:HD12         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB2         1:A:111:LEU:HD13         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD11         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD12         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD13         9         0.03           (1,715)         1:A:53:THR:HG21         1:A:55:SER:HG         1         0.03           (1,715)         1:A:53:THR:HG22         1:A:55:SER:HG         1         0.03           (1,713)         1:A:52:LE:HG21         1:A:56:LEU:HD21         14         0.03           (1,713)         1:A:52:LE:HG22         1:A:56:LEU:H	(1,750)	1:A:63:LEU:HB2	1:A:88:ALA:HB2	18	0.03
(1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB2         18         0.03           (1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,75)         1:A:87:ASN:HA         1:A:88:ALA:H         20         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB2         1:A:111:LEU:HD11         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB2         1:A:111:LEU:HD12         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD13         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD12         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD13         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD13         9         0.03           (1,715)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD13         9         0.03           (1,715)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:55:SER:HG         1         0.03           (1,715)         1:A:55:THR:HG21         1:A:55:SER:HG         1         0.03           (1,715)         1:A:52:TE:HG21         1:A:56:LEU:HD21         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG21         1:A:56:LEU:HD2	(1,750)	1:A:63:LEU:HB2	1:A:88:ALA:HB3	18	0.03
(1,750)         1:A:63:LEU:HB3         1:A:88:ALA:HB3         18         0.03           (1,75)         1:A:87:ASN:HA         1:A:88:ALA:H         20         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB2         1:A:111:LEU:HD11         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB2         1:A:111:LEU:HD12         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB2         1:A:111:LEU:HD13         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD11         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD12         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD13         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD13         9         0.03           (1,715)         1:A:53:THR:HG21         1:A:55:SER:HG         1         0.03           (1,715)         1:A:53:THR:HG22         1:A:55:SER:HG         1         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG23         1:A:56:LEU:HD21         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG22         1:A:56:LEU:HD23         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG22         1:A:56:LEU	(1,750)	1:A:63:LEU:HB3	1:A:88:ALA:HB1	18	0.03
(1,75)         1:A:87:ASN:HA         1:A:88:ALA:H         20         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB2         1:A:111:LEU:HD11         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB2         1:A:111:LEU:HD12         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB2         1:A:111:LEU:HD13         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD11         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD12         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD13         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD13         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:5111:LEU:HD13         9         0.03           (1,715)         1:A:53:THR:HG21         1:A:55:SER:HG         1         0.03           (1,715)         1:A:53:THR:HG22         1:A:56:LEU:HD21         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG21         1:A:56:LEU:HD22         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG22         1:A:56:LEU:HD21         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG22         1:A:5	(1,750)	1:A:63:LEU:HB3	1:A:88:ALA:HB2	18	0.03
(1,722)         1:A:57:LEU:HB2         1:A:111:LEU:HD11         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB2         1:A:111:LEU:HD12         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB2         1:A:111:LEU:HD13         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD11         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD12         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD13         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:511:LEU:HD13         9         0.03           (1,715)         1:A:53:THR:HG21         1:A:55:SER:HG         1         0.03           (1,715)         1:A:53:THR:HG22         1:A:55:SER:HG         1         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG23         1:A:56:LEU:HD21         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG21         1:A:56:LEU:HD23         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG22         1:A:56:LEU:HD21         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG22         1:A:56:LEU:HD23         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG23         1:	(1,750)	1:A:63:LEU:HB3	1:A:88:ALA:HB3	18	0.03
(1,722)         1:A:57:LEU:HB2         1:A:111:LEU:HD12         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB2         1:A:111:LEU:HD13         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD11         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD12         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD13         9         0.03           (1,715)         1:A:53:THR:HG21         1:A:55:SER:HG         1         0.03           (1,715)         1:A:53:THR:HG22         1:A:55:SER:HG         1         0.03           (1,715)         1:A:53:THR:HG23         1:A:55:SER:HG         1         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG21         1:A:56:LEU:HD21         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG21         1:A:56:LEU:HD22         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG22         1:A:56:LEU:HD21         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG22         1:A:56:LEU:HD22         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG23         1:A:56:LEU:HD21         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG23         1:A	(1,75)	1:A:87:ASN:HA	1:A:88:ALA:H	20	0.03
(1,722)         1:A:57:LEU:HB2         1:A:111:LEU:HD13         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD11         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD12         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD13         9         0.03           (1,715)         1:A:53:THR:HG21         1:A:55:SER:HG         1         0.03           (1,715)         1:A:53:THR:HG22         1:A:55:SER:HG         1         0.03           (1,715)         1:A:53:THR:HG23         1:A:55:SER:HG         1         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG21         1:A:56:LEU:HD21         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG21         1:A:56:LEU:HD22         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG22         1:A:56:LEU:HD21         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG22         1:A:56:LEU:HD22         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG23         1:A:56:LEU:HD21         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG23         1:A:56:LEU:HD22         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG23         1:	(1,722)	1:A:57:LEU:HB2	1:A:111:LEU:HD11	9	0.03
(1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD11         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD12         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD13         9         0.03           (1,715)         1:A:53:THR:HG21         1:A:55:SER:HG         1         0.03           (1,715)         1:A:53:THR:HG22         1:A:55:SER:HG         1         0.03           (1,715)         1:A:53:THR:HG23         1:A:55:SER:HG         1         0.03           (1,715)         1:A:53:THR:HG23         1:A:55:SER:HG         1         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG21         1:A:56:LEU:HD21         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG21         1:A:56:LEU:HD23         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG22         1:A:56:LEU:HD21         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG22         1:A:56:LEU:HD23         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG23         1:A:56:LEU:HD21         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG23         1:A:56:LEU:HD21         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG23         1:A:	(1,722)	1:A:57:LEU:HB2	1:A:111:LEU:HD12	9	0.03
(1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD12         9         0.03           (1,722)         1:A:57:LEU:HB3         1:A:111:LEU:HD13         9         0.03           (1,715)         1:A:53:THR:HG21         1:A:55:SER:HG         1         0.03           (1,715)         1:A:53:THR:HG22         1:A:55:SER:HG         1         0.03           (1,715)         1:A:53:THR:HG23         1:A:55:SER:HG         1         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG21         1:A:56:LEU:HD21         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG21         1:A:56:LEU:HD22         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG21         1:A:56:LEU:HD23         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG22         1:A:56:LEU:HD21         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG22         1:A:56:LEU:HD23         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG23         1:A:56:LEU:HD21         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG23         1:A:56:LEU:HD21         14         0.03           (1,713)         1:A:52:ILE:HG23         1:A:56:LEU:HD21         14         0.03	(1,722)	1:A:57:LEU:HB2	1:A:111:LEU:HD13	9	0.03
(1,722)       1:A:57:LEU:HB3       1:A:111:LEU:HD13       9       0.03         (1,715)       1:A:53:THR:HG21       1:A:55:SER:HG       1       0.03         (1,715)       1:A:53:THR:HG22       1:A:55:SER:HG       1       0.03         (1,715)       1:A:53:THR:HG23       1:A:55:SER:HG       1       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG21       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG21       1:A:56:LEU:HD23       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG22       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG22       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03	(1,722)	1:A:57:LEU:HB3	1:A:111:LEU:HD11	9	0.03
(1,715)       1:A:53:THR:HG21       1:A:55:SER:HG       1       0.03         (1,715)       1:A:53:THR:HG22       1:A:55:SER:HG       1       0.03         (1,715)       1:A:53:THR:HG23       1:A:55:SER:HG       1       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG21       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG21       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG21       1:A:56:LEU:HD23       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG22       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG22       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD23       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03	(1,722)	1:A:57:LEU:HB3	1:A:111:LEU:HD12	9	0.03
(1,715)       1:A:53:THR:HG22       1:A:55:SER:HG       1       0.03         (1,715)       1:A:53:THR:HG23       1:A:55:SER:HG       1       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG21       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG21       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG21       1:A:56:LEU:HD23       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG22       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG22       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD23       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03	(1,722)	1:A:57:LEU:HB3	1:A:111:LEU:HD13	9	0.03
(1,715)       1:A:53:THR:HG23       1:A:55:SER:HG       1       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG21       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG21       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG21       1:A:56:LEU:HD23       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG22       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG22       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG22       1:A:56:LEU:HD23       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03	(1,715)	1:A:53:THR:HG21	1:A:55:SER:HG	1	0.03
(1,715)       1:A:53:THR:HG23       1:A:55:SER:HG       1       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG21       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG21       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG21       1:A:56:LEU:HD23       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG22       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG22       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD23       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03	· · /	1:A:53:THR:HG22	1:A:55:SER:HG	1	0.03
(1,713)       1:A:52:ILE:HG21       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG21       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG21       1:A:56:LEU:HD23       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG22       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG22       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG22       1:A:56:LEU:HD23       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03	` '	1:A:53:THR:HG23	1:A:55:SER:HG	1	0.03
(1,713)       1:A:52:ILE:HG21       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG21       1:A:56:LEU:HD23       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG22       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG22       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG22       1:A:56:LEU:HD23       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03		1:A:52:ILE:HG21	1:A:56:LEU:HD21	14	0.03
(1,713)       1:A:52:ILE:HG21       1:A:56:LEU:HD23       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG22       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG22       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG22       1:A:56:LEU:HD23       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03		1:A:52:ILE:HG21	1:A:56:LEU:HD22	14	0.03
(1,713)       1:A:52:ILE:HG22       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG22       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG22       1:A:56:LEU:HD23       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03		1:A:52:ILE:HG21	1:A:56:LEU:HD23	14	0.03
(1,713)       1:A:52:ILE:HG22       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG22       1:A:56:LEU:HD23       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03		1:A:52:ILE:HG22	1:A:56:LEU:HD21	14	0.03
(1,713)       1:A:52:ILE:HG22       1:A:56:LEU:HD23       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03		1:A:52:ILE:HG22	1:A:56:LEU:HD22	14	0.03
(1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD21       14       0.03         (1,713)       1:A:52:ILE:HG23       1:A:56:LEU:HD22       14       0.03		1:A:52:ILE:HG22	1:A:56:LEU:HD23	14	0.03
		1:A:52:ILE:HG23	1:A:56:LEU:HD21	14	0.03
(1,713) 1:A:52:ILE:HG23 1:A:56:LEU:HD23 14 0.03	(1,713)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:56:LEU:HD22	14	0.03
	(1,713)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:56:LEU:HD23	14	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,695)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:56:LEU:HD11	12	0.03
(1,695)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:56:LEU:HD12	12	0.03
(1,695)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:56:LEU:HD13	12	0.03
(1,695)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:56:LEU:HD11	12	0.03
(1,695)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:56:LEU:HD12	12	0.03
(1,695)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:56:LEU:HD13	12	0.03
(1,695)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:56:LEU:HD11	12	0.03
(1,695)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:56:LEU:HD12	12	0.03
(1,695)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:56:LEU:HD13	12	0.03
(1,69)	1:A:38:GLU:HA	1:A:39:GLY:H	13	0.03
(1,686)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:51:ASP:HB2	18	0.03
(1,686)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:51:ASP:HB2	18	0.03
(1,686)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:51:ASP:HB2	18	0.03
(1,673)	1:A:44:TRP:HZ2	1:A:94:VAL:HG21	5	0.03
(1,673)	1:A:44:TRP:HZ2	1:A:94:VAL:HG22	5	0.03
(1,673)	1:A:44:TRP:HZ2	1:A:94:VAL:HG23	5	0.03
(1,640)	1:A:34:ALA:HB1	1:A:44:TRP:HB2	18	0.03
(1,640)	1:A:34:ALA:HB1	1:A:44:TRP:HB3	18	0.03
(1,640)	1:A:34:ALA:HB2	1:A:44:TRP:HB2	18	0.03
(1,640)	1:A:34:ALA:HB2	1:A:44:TRP:HB3	18	0.03
(1,640)	1:A:34:ALA:HB3	1:A:44:TRP:HB2	18	0.03
(1,640)	1:A:34:ALA:HB3	1:A:44:TRP:HB3	18	0.03
(1,626)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:44:TRP:HB2	18	0.03
(1,626)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:44:TRP:HB3	18	0.03
(1,626)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:44:TRP:HB2	18	0.03
(1,626)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:44:TRP:HB3	18	0.03
(1,626)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:44:TRP:HB2	18	0.03
(1,626)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:44:TRP:HB3	18	0.03
(1,617)	1:A:31:HIS:HE1	1:A:33:ILE:HG21	19	0.03
(1,617)	1:A:31:HIS:HE1	1:A:33:ILE:HG22	19	0.03
(1,617)	1:A:31:HIS:HE1	1:A:33:ILE:HG23	19	0.03
(1,588)	1:A:22:ILE:HG21	1:A:127:ALA:HB1	12	0.03
(1,588)	1:A:22:ILE:HG21	1:A:127:ALA:HB2	12	0.03
(1,588)	1:A:22:ILE:HG21	1:A:127:ALA:HB3	12	0.03
(1,588)	1:A:22:ILE:HG22	1:A:127:ALA:HB1	12	0.03
(1,588)	1:A:22:ILE:HG22	1:A:127:ALA:HB2	12	0.03
(1,588)	1:A:22:ILE:HG22	1:A:127:ALA:HB3	12	0.03
(1,588)	1:A:22:ILE:HG23	1:A:127:ALA:HB1	12	0.03
(1,588)	1:A:22:ILE:HG23	1:A:127:ALA:HB2	12	0.03
(1,588)	1:A:22:ILE:HG23	1:A:127:ALA:HB3	12	0.03
(1,577)	1:A:17:TYR:HE1	1:A:127:ALA:HB1	5	0.03
(1,577)	1:A:17:TYR:HE1	1:A:127:ALA:HB2	5	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,577)	1:A:17:TYR:HE1	1:A:127:ALA:HB3	5	0.03
(1,577)	1:A:17:TYR:HE2	1:A:127:ALA:HB1	5	0.03
(1,577)	1:A:17:TYR:HE2	1:A:127:ALA:HB2	5	0.03
(1,577)	1:A:17:TYR:HE2	1:A:127:ALA:HB3	5	0.03
(1,575)	1:A:16:ALA:HB1	1:A:23:GLU:HB2	13	0.03
(1,575)	1:A:16:ALA:HB1	1:A:23:GLU:HB3	13	0.03
(1,575)	1:A:16:ALA:HB2	1:A:23:GLU:HB2	13	0.03
(1,575)	1:A:16:ALA:HB2	1:A:23:GLU:HB3	13	0.03
(1,575)	1:A:16:ALA:HB3	1:A:23:GLU:HB2	13	0.03
(1,575)	1:A:16:ALA:HB3	1:A:23:GLU:HB3	13	0.03
(1,57)	1:A:19:ASP:HA	1:A:20:GLY:H	12	0.03
(1,558)	1:A:13:THR:HB	1:A:15:THR:HG21	8	0.03
(1,558)	1:A:13:THR:HB	1:A:15:THR:HG22	8	0.03
(1,558)	1:A:13:THR:HB	1:A:15:THR:HG23	8	0.03
(1,535)	1:A:119:GLU:HA	1:A:121:MET:HE1	17	0.03
(1,535)	1:A:119:GLU:HA	1:A:121:MET:HE2	17	0.03
(1,535)	1:A:119:GLU:HA	1:A:121:MET:HE3	17	0.03
(1,498)	1:A:89:PRO:HA	1:A:139:ARG:HB2	11	0.03
(1,498)	1:A:89:PRO:HA	1:A:139:ARG:HB3	11	0.03
(1,485)	1:A:53:THR:HA	1:A:107:GLN:HG2	4	0.03
(1,485)	1:A:53:THR:HA	1:A:107:GLN:HG3	4	0.03
(1,477)	1:A:47:GLN:HA	1:A:146:PRO:HD2	19	0.03
(1,477)	1:A:47:GLN:HA	1:A:146:PRO:HD3	19	0.03
(1,439)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:37:PRO:HA	19	0.03
(1,439)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:37:PRO:HA	19	0.03
(1,438)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:37:PRO:HA	1	0.03
(1,438)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:37:PRO:HA	1	0.03
(1,438)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:37:PRO:HA	1	0.03
(1,415)	1:A:88:ALA:H	1:A:116:VAL:HG21	14	0.03
(1,415)	1:A:88:ALA:H	1:A:116:VAL:HG22	14	0.03
(1,415)	1:A:88:ALA:H	1:A:116:VAL:HG23	14	0.03
(1,415)	1:A:88:ALA:H	1:A:116:VAL:HG21	20	0.03
(1,415)	1:A:88:ALA:H	1:A:116:VAL:HG22	20	0.03
(1,415)	1:A:88:ALA:H	1:A:116:VAL:HG23	20	0.03
(1,398)	1:A:121:MET:HE1	1:A:130:TYR:H	17	0.03
(1,398)	1:A:121:MET:HE2	1:A:130:TYR:H	17	0.03
(1,398)	1:A:121:MET:HE3	1:A:130:TYR:H	17	0.03
(1,367)	1:A:15:THR:HG21	1:A:26:GLN:H	15	0.03
(1,367)	1:A:15:THR:HG22	1:A:26:GLN:H	15	0.03
(1,367)	1:A:15:THR:HG23	1:A:26:GLN:H	15	0.03
(1,340)	1:A:33:ILE:HA	1:A:42:ALA:H	3	0.03
(1,24)	1:A:87:ASN:H	1:A:88:ALA:H	18	0.03



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

(1,23)         1:A:63:LEU:H         1:A:64:ALA:H         6         0.03           (1,218)         1:A:63:LEU:H         1:A:64:ALA:H         6         0.03           (1,218)         1:A:53:THR:HG21         1:A:54:ALA:H         20         0.03           (1,218)         1:A:53:THR:HG22         1:A:54:ALA:H         20         0.03           (1,218)         1:A:53:THR:HG23         1:A:54:ALA:H         20         0.03           (1,218)         1:A:53:THR:HG23         1:A:54:ALA:H         20         0.03           (1,218)         1:A:53:THR:HG23         1:A:54:ALA:H         20         0.03           (1,125)         1:A:144:LEU:O         1:A:33:ILE:H         2         0.03           (1,1125)         1:A:144:LEU:O         1:A:33:ILE:H         17         0.03           (1,1120)         1:A:143:ALA:O         1:A:95:GLY:N         6         0.03           (1,1101)         1:A:128:ARG:O         1:A:19:VALN         10         0.03           (1,1101)         1:A:124:GLN:O         1:A:128:ARG:H         18         0.03           (1,1001)         1:A:147:ASP:HA         1:A:149:ASP:H         7         0.03           (1,1001)         1:A:147:ASP:HA         1:A:143:GLY:H         7	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,218) 1:A:53:THR:HG21 1:A:54:ALA:H 20 0.03 (1,218) 1:A:53:THR:HG22 1:A:54:ALA:H 20 0.03 (1,203) 1:A:53:THR:HG23 1:A:54:ALA:H 20 0.03 (1,203) 1:A:23:GLU:HG3 1:A:24:VAL:H 2 0.03 (1,130) 1:A:51:ASP:H 1:A:52:ILE:H 8 0.03 (1,1125) 1:A:144:LEU:O 1:A:33:ILE:H 12 0.03 (1,1125) 1:A:144:LEU:O 1:A:33:ILE:H 17 0.03 (1,1125) 1:A:144:LEU:O 1:A:33:ILE:H 17 0.03 (1,1121) 1:A:139:ARG:O 1:A:95:GLY:N 6 0.03 (1,1109) 1:A:128:ARG:O 1:A:91:VAL:N 10 0.03 (1,1109) 1:A:128:ARG:O 1:A:13:ILE:H 13 0.03 (1,1109) 1:A:128:ARG:O 1:A:13:ILE:H 13 0.03 (1,100) 1:A:147:ASP:HA 1:A:128:ARG:H 18 0.03 (1,100) 1:A:147:ASP:HA 1:A:149:ASP:H 7 0.03 (1,100) 1:A:147:ASP:HA 1:A:149:ASP:H 7 0.03 (1,100) 1:A:147:ASP:HA 1:A:149:ASP:H 7 0.03 (1,100) 1:A:147:ASP:HA 1:A:148:GDY:H 7 0.03 (1,93) 1:A:136:GLU:HA 1:A:137:GLY:H 4 0.02 (1,858) 1:A:123:THR:HG21 1:A:144:LEU:HD21 1 0.02 (1,858) 1:A:123:THR:HG21 1:A:144:LEU:HD22 1 0.02 (1,858) 1:A:123:THR:HG22 1:A:144:LEU:HD23 1 0.02 (1,858) 1:A:123:THR:HG23 1:A:144:LEU:HD21 1 0.02 (1,858) 1:A:111:LEU:HD11 1:A:114:MET:HE1 1 0.02 (1,858) 1:A:111:LEU:HD11 1:A:114:MET:HE2 1 0.02 (1,858) 1:A:111:LEU:HD11 1:A:114:MET:HE3 1 0.02 (1,835) 1:A:111:LEU:HD11 1:A:114:MET:HE3 3 0	(1,23)	1:A:86:ALA:H	1:A:87:ASN:H	7	0.03
(1,218)         1:A:53:THR:HG22         1:A:54:ALA:H         20         0.03           (1,218)         1:A:53:THR:HG23         1:A:54:ALA:H         20         0.03           (1,203)         1:A:23:GLU:HG3         1:A:52:ALE:H         2         0.03           (1,13)         1:A:51:ASP:H         1:A:52:ILE:H         8         0.03           (1,1125)         1:A:144:LEU:O         1:A:33:ILE:H         17         0.03           (1,1122)         1:A:143:ALA:O         1:A:95:GLY:N         6         0.03           (1,1109)         1:A:128:ARG:O         1:A:91:VALE:H         13         0.03           (1,1109)         1:A:124:GLN:O         1:A:128:ARG:H         18         0.03           (1,109)         1:A:147:ASP:HA         1:A:128:ARG:H         18         0.03           (1,107)         1:A:147:ASP:HA         1:A:149:ASP:H         7         0.03           (1,207)         1:A:13:36:GLU:HA         1:A:137:GLY:H         7         0.03           (1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD23	(1,22)	1:A:63:LEU:H	1:A:64:ALA:H	6	0.03
(1,218) 1:A:53:THR:HG23 1:A:54:ALA:H 20 0.03 (1,203) 1:A:23:GLU:HG3 1:A:24:VAL:H 2 0.03 (1,113) 1:A:51:ASP:H 1:A:52:ILE:H 8 0.03 (1,1125) 1:A:144:LEU:O 1:A:33:ILE:H 12 0.03 (1,1125) 1:A:144:LEU:O 1:A:33:ILE:H 17 0.03 (1,1125) 1:A:144:LEU:O 1:A:33:ILE:H 17 0.03 (1,1126) 1:A:143:ALA:O 1:A:95:GLY:N 6 0.03 (1,1127) 1:A:139:ARG:O 1:A:91:VAL:N 10 0.03 (1,1109) 1:A:128:ARG:O 1:A:132:ILE:H 13 0.03 (1,1109) 1:A:128:ARG:O 1:A:132:ILE:H 13 0.03 (1,1101) 1:A:124:GLN:O 1:A:128:ARG:H 18 0.03 (1,1000) 1:A:117:GLY:O 1:A:92:LEU:N 2 0.03 (1,107) 1:A:147:ASP:HA 1:A:149:ASP:H 7 0.03 (1,100) 1:A:136:GLU:HA 1:A:137:GLY:H 7 0.03 (1,33) 1:A:123:THR:HG21 1:A:144:LEU:HD21 1 0.02 (1,858) 1:A:123:THR:HG21 1:A:144:LEU:HD21 1 0.02 (1,858) 1:A:123:THR:HG21 1:A:144:LEU:HD22 1 0.02 (1,858) 1:A:123:THR:HG22 1:A:144:LEU:HD21 1 0.02 (1,858) 1:A:123:THR:HG23 1:A:144:LEU:HD22 1 0.02 (1,858) 1:A:123:THR:HG23 1:A:144:LEU:HD22 1 0.02 (1,858) 1:A:123:THR:HG23 1:A:144:LEU:HD22 1 0.02 (1,858) 1:A:123:THR:HG23 1:A:144:LEU:HD23 1 0.02 (1,858) 1:A:111:LEU:HD11 1:A:114:MET:HE1 1 0.02 (1,858) 1:A:111:LEU:HD11 1:A:114:MET:HE1 1 0.02 (1,835) 1:A:111:LEU:HD11 1:A:114:MET:HE1 1 0.02 (1,835) 1:A:111:LEU:HD11 1:A:114:MET:HE2 1 0.02 (1,835) 1:A:111:LEU:HD11 1:A:114:MET:HE3 1 0.02 (1,835) 1:A:111:LEU:HD12 1:A:114:MET:HE3 1 0.02 (1,835) 1:A:111:LEU:HD11	(1,218)	1:A:53:THR:HG21	1:A:54:ALA:H	20	0.03
(1,203)         1:A:23:GLU:HG3         1:A:24:VAL:H         2         0.03           (1,13)         1:A:51:ASP:H         1:A:52:ILE:H         8         0.03           (1,1125)         1:A:144:LEU:O         1:A:33:ILE:H         12         0.03           (1,1125)         1:A:144:LEU:O         1:A:33:ILE:H         17         0.03           (1,1122)         1:A:143:ALA:O         1:A:95:GLY:N         6         0.03           (1,1101)         1:A:139:ARG:O         1:A:191:VAL:N         10         0.03           (1,1101)         1:A:128:ARG:O         1:A:128:ARG:H         18         0.03           (1,100)         1:A:17:GLY:O         1:A:28:ARG:H         18         0.03           (1,100)         1:A:147:ASP:HA         1:A:148:GLY:H         7         0.03           (1,100)         1:A:147:ASP:HA         1:A:148:GLY:H         7         0.03           (1,93)         1:A:136:GLU:HA         1:A:148:GLY:H         7         0.03           (1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD21         1 </td <td>(1,218)</td> <td>1:A:53:THR:HG22</td> <td>1:A:54:ALA:H</td> <td>20</td> <td>0.03</td>	(1,218)	1:A:53:THR:HG22	1:A:54:ALA:H	20	0.03
(1,13) 1:A:51:ASP:H 1:A:52:ILE:H 8 0.03 (1,1125) 1:A:144:LEU:O 1:A:33:ILE:H 12 0.03 (1,1122) 1:A:143:ALA:O 1:A:93:GLY:N 6 0.03 (1,1116) 1:A:139:ARG:O 1:A:91:VAL:N 10 0.03 (1,1110) 1:A:128:ARG:O 1:A:132:ILE:H 13 0.03 (1,1101) 1:A:124:GLN:O 1:A:128:ARG:H 18 0.03 (1,109) 1:A:117:GLY:O 1:A:92:LEU:N 2 0.03 (1,107) 1:A:147:ASP:HA 1:A:149:ASP:H 7 0.03 (1,109) 1:A:147:ASP:HA 1:A:148:GLY:H 7 0.03 (1,109) 1:A:123:THR:HG21 1:A:144:LEU:HD21 1 0.02 (1,858) 1:A:123:THR:HG21 1:A:144:LEU:HD22 1 0.02 (1,858) 1:A:123:THR:HG21 1:A:144:LEU:HD22 1 0.02 (1,858) 1:A:123:THR:HG21 1:A:144:LEU:HD22 1 0.02 (1,858) 1:A:123:THR:HG22 1:A:144:LEU:HD21 1 0.02 (1,858) 1:A:123:THR:HG22 1:A:144:LEU:HD22 1 0.02 (1,858) 1:A:123:THR:HG22 1:A:144:LEU:HD22 1 0.02 (1,858) 1:A:123:THR:HG22 1:A:144:LEU:HD22 1 0.02 (1,858) 1:A:123:THR:HG22 1:A:144:LEU:HD22 1 0.02 (1,858) 1:A:123:THR:HG23 1:A:144:LEU:HD22 1 0.02 (1,858) 1:A:123:THR:HG23 1:A:144:LEU:HD22 1 0.02 (1,858) 1:A:123:THR:HG23 1:A:144:LEU:HD21 1 0.02 (1,858) 1:A:123:THR:HG23 1:A:144:LEU:HD22 1 0.02 (1,858) 1:A:123:THR:HG23 1:A:144:LEU:HD21 1 0.02 (1,858) 1:A:111:LEU:HD11 1:A:114:MET:HE1 1 0.02 (1,835) 1:A:111:LEU:HD11 1:A:114:MET:HE2 1 0.02 (1,835) 1:A:111:LEU:HD11 1:A:114:MET:HE2 1 0.02 (1,835) 1:A:111:LEU:HD11 1:A:114:MET:HE2 1 0.02 (1,835) 1:A:111:LEU:HD11 1:A:114:MET:HE3 1 0.02 (1,835) 1:A:111:LEU:HD11 1:A:114:MET:HE3 1 0.02 (1,835) 1:A:111:LEU:HD11 1:A:114:MET:HE1 1 0.02 (1,835) 1:A:111:LEU:HD11 1:A:114:MET:HE2 1 0.02 (1,835) 1:A:111:LEU:HD11 1:A:114:MET:HE3 1 0.02 (1,835) 1:A:111:LEU:HD13 1:A:114:MET:HE3 1 0.02 (1,835) 1:A:111:LEU:HD13 1:A:114:MET:HE3 1 0.02 (1,835) 1:A:111:LEU:HD13 1:A:114:MET:HE3 1 0.02 (1,835) 1:A:111:LEU:HD11 1:A:114:MET:HE3 1 0.02 (1,835) 1:A:111:LEU:HD11 1:A:114:MET:HE3 1 0.02 (1,835) 1:A:111:LEU:HD11 1:A:114:MET:HE3 3 0.02 (1,835) 1:A:111	(1,218)	1:A:53:THR:HG23	1:A:54:ALA:H	20	0.03
(1,1125)         1:A:144:LEU:O         1:A:33:ILE:H         12         0.03           (1,1125)         1:A:144:LEU:O         1:A:33:ILE:H         17         0.03           (1,1122)         1:A:143:ALA:O         1:A:95:GIY:N         6         0.03           (1,1106)         1:A:139:ARG:O         1:A:132:ILE:H         13         0.03           (1,1109)         1:A:124:GLN:O         1:A:128:ARG:H         18         0.03           (1,109)         1:A:117:GLY:O         1:A:128:ARG:H         18         0.03           (1,109)         1:A:147:ASP:HA         1:A:149:ASP:H         7         0.03           (1,107)         1:A:147:ASP:HA         1:A:148:GLY:H         7         0.03           (1,93)         1:A:136:GLU:HA         1:A:148:GLY:H         7         0.03           (1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD23 <td>(1,203)</td> <td>1:A:23:GLU:HG3</td> <td>1:A:24:VAL:H</td> <td>2</td> <td>0.03</td>	(1,203)	1:A:23:GLU:HG3	1:A:24:VAL:H	2	0.03
(1,1125)         1:A:144:LEU:O         1:A:33:ILE:H         17         0.03           (1,1122)         1:A:143:ALA:O         1:A:95:GLY:N         6         0.03           (1,1116)         1:A:139:ARG:O         1:A:91:VAL:N         10         0.03           (1,1109)         1:A:128:ARG:O         1:A:132:ILE:H         13         0.03           (1,109)         1:A:147:ASP:HO         1:A:128:ARG:H         18         0.03           (1,109)         1:A:147:ASP:HA         1:A:149:ASP:H         7         0.03           (1,107)         1:A:147:ASP:HA         1:A:149:ASP:H         7         0.03           (1,100)         1:A:147:ASP:HA         1:A:149:ASP:H         7         0.03           (1,33)         1:A:136:GLU:HA         1:A:137:GLY:H         4         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD23 <td>(1,13)</td> <td>1:A:51:ASP:H</td> <td>1:A:52:ILE:H</td> <td>8</td> <td>0.03</td>	(1,13)	1:A:51:ASP:H	1:A:52:ILE:H	8	0.03
(1,1122)         1:A:143:ALA:O         1:A:95:GIY:N         6         0.03           (1,1116)         1:A:139:ARG:O         1:A:91:VAL:N         10         0.03           (1,1109)         1:A:128:ARG:O         1:A:132:ILE:H         13         0.03           (1,101)         1:A:128:ARG:O         1:A:128:ARG:H         18         0.03           (1,109)         1:A:147:ASP:HA         1:A:128:ARG:H         18         0.03           (1,107)         1:A:147:ASP:HA         1:A:149:ASP:H         7         0.03           (1,100)         1:A:147:ASP:HA         1:A:148:GLY:H         7         0.03           (1,93)         1:A:136:GLU:HA         1:A:137:GLY:H         4         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD2	(1,1125)	1:A:144:LEU:O	1:A:33:ILE:H	12	0.03
(1,1116)         1:A:139:ARG:O         1:A:91:VAL:N         10         0.03           (1,1109)         1:A:128:ARG:O         1:A:132:ILE:H         13         0.03           (1,101)         1:A:128:ARG:O         1:A:128:ARG:H         18         0.03           (1,109)         1:A:147:ASP:HA         1:A:129:LEU:N         2         0.03           (1,107)         1:A:147:ASP:HA         1:A:149:ASP:H         7         0.03           (1,100)         1:A:147:ASP:HA         1:A:148:GLY:H         7         0.03           (1,93)         1:A:136:GLU:HA         1:A:137:GLY:H         4         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LE	(1,1125)	1:A:144:LEU:O	1:A:33:ILE:H	17	0.03
(1,1109)         1:A:128:ARG:O         1:A:132:ILE:H         13         0.03           (1,1101)         1:A:124:GLN:O         1:A:128:ARG:H         18         0.03           (1,1090)         1:A:117:GLY:O         1:A:92:LEU:N         2         0.03           (1,107)         1:A:147:ASP:HA         1:A:149:ASP:H         7         0.03           (1,100)         1:A:147:ASP:HA         1:A:148:GLY:H         7         0.03           (1,93)         1:A:135:GEU:HA         1:A:137:GLY:H         4         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:1	(1,1122)	1:A:143:ALA:O	1:A:95:GLY:N	6	0.03
(1,1101)         1:A:124:GLN:O         1:A:128:ARG:H         18         0.03           (1,1090)         1:A:117:GLY:O         1:A:92:LEU:N         2         0.03           (1,107)         1:A:147:ASP:HA         1:A:149:ASP:H         7         0.03           (1,100)         1:A:147:ASP:HA         1:A:148:GLY:H         7         0.03           (1,93)         1:A:136:GLU:HA         1:A:137:GLY:H         4         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:111:LEU:HD11         1	(1,1116)	1:A:139:ARG:O	1:A:91:VAL:N	10	0.03
(1,1090)         1:A:117:GLY:O         1:A:92:LEU:N         2         0.03           (1,107)         1:A:147:ASP:HA         1:A:149:ASP:H         7         0.03           (1,100)         1:A:147:ASP:HA         1:A:148:GLY:H         7         0.03           (1,93)         1:A:136:GLU:HA         1:A:137:GLY:H         4         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:111:LEU:HD11         <	(1,1109)	1:A:128:ARG:O	1:A:132:ILE:H	13	0.03
(1,107)         1:A:147:ASP:HA         1:A:149:ASP:H         7         0.03           (1,100)         1:A:147:ASP:HA         1:A:148:GLY:H         7         0.03           (1,93)         1:A:136:GLU:HA         1:A:137:GLY:H         4         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23	(1,1101)	1:A:124:GLN:O	1:A:128:ARG:H	18	0.03
(1,100)         1:A:147:ASP:HA         1:A:148:GLY:H         7         0.03           (1,93)         1:A:136:GLU:HA         1:A:137:GLY:H         4         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE2         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11	(1,1090)	1:A:117:GLY:O	1:A:92:LEU:N	2	0.03
(1,93)         1:A:136:GLU:HA         1:A:137:GLY:H         4         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:111:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:14:MET:HE1         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD12         1:A:14:MET:HE3 <td>(1,107)</td> <td>1:A:147:ASP:HA</td> <td>1:A:149:ASP:H</td> <td>7</td> <td>0.03</td>	(1,107)	1:A:147:ASP:HA	1:A:149:ASP:H	7	0.03
(1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:144:MET:HE1         1         0.02           (1,858)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE2         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD12         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:H	(1,100)	1:A:147:ASP:HA	1:A:148:GLY:H	7	0.03
(1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:144:MET:HE1         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE2         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD12         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD12         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD	(1,93)	1:A:136:GLU:HA	1:A:137:GLY:H	4	0.02
(1,858)         1:A:123:THR:HG21         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE1         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD12         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:H	(1,858)	1:A:123:THR:HG21	1:A:144:LEU:HD21	1	0.02
(1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:121:LEU:HD11         1:A:144:MET:HE1         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE2         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD12         1:A:114:MET:HE2         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11	(1,858)	1:A:123:THR:HG21	1:A:144:LEU:HD22	1	0.02
(1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:121:LEU:HD11         1:A:14:MET:HE1         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD12         1:A:114:MET:HE1         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD12         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD13<	(1,858)	1:A:123:THR:HG21	1:A:144:LEU:HD23	1	0.02
(1,858)         1:A:123:THR:HG22         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,858)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:14:MET:HE1         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:14:MET:HE2         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD12         1:A:114:MET:HE2         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD12         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:114:MET:HE1         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:114:MET:HE2         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE3         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:1	(1,858)	1:A:123:THR:HG22	1:A:144:LEU:HD21	1	0.02
(1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD21         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD22         1         0.02           (1,858)         1:A:123:THR:HG23         1:A:144:LEU:HD23         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE1         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE2         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD12         1:A:114:MET:HE1         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD12         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:114:MET:HE1         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:114:MET:HE2         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE3         3         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11 <td>(1,858)</td> <td>1:A:123:THR:HG22</td> <td>1:A:144:LEU:HD22</td> <td>1</td> <td>0.02</td>	(1,858)	1:A:123:THR:HG22	1:A:144:LEU:HD22	1	0.02
(1,858)       1:A:123:THR:HG23       1:A:144:LEU:HD22       1       0.02         (1,858)       1:A:123:THR:HG23       1:A:144:LEU:HD23       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE1       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE2       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE3       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE1       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE3       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD13       1:A:114:MET:HE3       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD13       1:A:114:MET:HE3       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD13       1:A:114:MET:HE3       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE3       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE2       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE3       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE3       3       0.02         (1,835)       1:	(1,858)	1:A:123:THR:HG22	1:A:144:LEU:HD23	1	0.02
(1,858)       1:A:123:THR:HG23       1:A:144:LEU:HD23       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE1       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE2       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE3       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE1       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE3       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE3       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD13       1:A:114:MET:HE1       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD13       1:A:114:MET:HE3       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD13       1:A:114:MET:HE3       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE3       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE3       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE3       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE3       3       0.02         (1,835)       1:A	(1,858)	1:A:123:THR:HG23	1:A:144:LEU:HD21	1	0.02
(1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE1         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE2         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD12         1:A:114:MET:HE1         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD12         1:A:114:MET:HE2         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD12         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:114:MET:HE1         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE1         3         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE2         3         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE3         3         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD12         1:A:114:MET:HE3         3         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD12         1:A:114:MET:HE3         3         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD12	(1,858)	1:A:123:THR:HG23	1:A:144:LEU:HD22	1	0.02
(1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE2         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD12         1:A:114:MET:HE1         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD12         1:A:114:MET:HE2         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:114:MET:HE2         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE1         3         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE2         3         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE3         3         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD12         1:A:114:MET:HE1         3         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD12         1:A:114:MET:HE3         3         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD12         1:A:114:MET:HE3         3         0.02	(1,858)	1:A:123:THR:HG23	1:A:144:LEU:HD23	1	0.02
(1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD12         1:A:114:MET:HE1         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD12         1:A:114:MET:HE2         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:114:MET:HE2         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD13         1:A:114:MET:HE3         1         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE2         3         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD11         1:A:114:MET:HE3         3         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD12         1:A:114:MET:HE1         3         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD12         1:A:114:MET:HE2         3         0.02           (1,835)         1:A:111:LEU:HD12         1:A:114:MET:HE3         3         0.02	(1,835)	1:A:111:LEU:HD11	1:A:114:MET:HE1	1	0.02
(1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE1       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE2       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE3       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD13       1:A:114:MET:HE1       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD13       1:A:114:MET:HE3       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE1       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE2       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE3       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE1       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE2       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE3       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE3       3       0.02	(1,835)	1:A:111:LEU:HD11	1:A:114:MET:HE2	1	0.02
(1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE2       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE3       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD13       1:A:114:MET:HE1       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD13       1:A:114:MET:HE2       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD13       1:A:114:MET:HE3       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE1       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE3       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE1       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE2       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE3       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE3       3       0.02	(1,835)	1:A:111:LEU:HD11	1:A:114:MET:HE3	1	0.02
(1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE3       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD13       1:A:114:MET:HE1       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD13       1:A:114:MET:HE2       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD13       1:A:114:MET:HE3       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE1       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE3       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE1       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE2       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE3       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE3       3       0.02	(1,835)	1:A:111:LEU:HD12	1:A:114:MET:HE1	1	0.02
(1,835)       1:A:111:LEU:HD13       1:A:114:MET:HE1       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD13       1:A:114:MET:HE2       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD13       1:A:114:MET:HE3       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE1       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE2       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE1       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE2       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE2       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE3       3       0.02	(1,835)	1:A:111:LEU:HD12	1:A:114:MET:HE2	1	0.02
(1,835)       1:A:111:LEU:HD13       1:A:114:MET:HE1       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD13       1:A:114:MET:HE2       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD13       1:A:114:MET:HE3       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE1       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE2       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE1       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE2       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE2       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE3       3       0.02	(1,835)	1:A:111:LEU:HD12	1:A:114:MET:HE3	1	0.02
(1,835)       1:A:111:LEU:HD13       1:A:114:MET:HE3       1       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE1       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE2       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE3       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE1       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE2       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE3       3       0.02		1:A:111:LEU:HD13	1:A:114:MET:HE1	1	0.02
(1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE1       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE2       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE3       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE1       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE2       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE3       3       0.02	(1,835)	1:A:111:LEU:HD13	1:A:114:MET:HE2	1	0.02
(1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE2       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE3       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE1       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE2       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE3       3       0.02	(1,835)	1:A:111:LEU:HD13	1:A:114:MET:HE3	1	0.02
(1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE3       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE1       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE2       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE3       3       0.02	` ,	1:A:111:LEU:HD11	1:A:114:MET:HE1	3	0.02
(1,835)       1:A:111:LEU:HD11       1:A:114:MET:HE3       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE1       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE2       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE3       3       0.02	(1,835)	1:A:111:LEU:HD11	1:A:114:MET:HE2	3	0.02
(1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE1       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE2       3       0.02         (1,835)       1:A:111:LEU:HD12       1:A:114:MET:HE3       3       0.02		1:A:111:LEU:HD11	1:A:114:MET:HE3	3	0.02
(1,835) 1:A:111:LEU:HD12 1:A:114:MET:HE3 3 0.02		1:A:111:LEU:HD12	1:A:114:MET:HE1	3	0.02
( ' '		1:A:111:LEU:HD12	1:A:114:MET:HE2	3	0.02
(1.835) 1:A:111:LEU:HD13 1:A:114:MET:HE1 3 0.02	(1,835)	1:A:111:LEU:HD12	1:A:114:MET:HE3	3	0.02
\	(1,835)	1:A:111:LEU:HD13	1:A:114:MET:HE1	3	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,835)	1:A:111:LEU:HD13	1:A:114:MET:HE2	3	0.02
(1,835)	1:A:111:LEU:HD13	1:A:114:MET:HE3	3	0.02
(1,835)	1:A:111:LEU:HD11	1:A:114:MET:HE1	6	0.02
(1,835)	1:A:111:LEU:HD11	1:A:114:MET:HE2	6	0.02
(1,835)	1:A:111:LEU:HD11	1:A:114:MET:HE3	6	0.02
(1,835)	1:A:111:LEU:HD12	1:A:114:MET:HE1	6	0.02
(1,835)	1:A:111:LEU:HD12	1:A:114:MET:HE2	6	0.02
(1,835)	1:A:111:LEU:HD12	1:A:114:MET:HE3	6	0.02
(1,835)	1:A:111:LEU:HD13	1:A:114:MET:HE1	6	0.02
(1,835)	1:A:111:LEU:HD13	1:A:114:MET:HE2	6	0.02
(1,835)	1:A:111:LEU:HD13	1:A:114:MET:HE3	6	0.02
(1,835)	1:A:111:LEU:HD11	1:A:114:MET:HE1	10	0.02
(1,835)	1:A:111:LEU:HD11	1:A:114:MET:HE2	10	0.02
(1,835)	1:A:111:LEU:HD11	1:A:114:MET:HE3	10	0.02
(1,835)	1:A:111:LEU:HD12	1:A:114:MET:HE1	10	0.02
(1,835)	1:A:111:LEU:HD12	1:A:114:MET:HE2	10	0.02
(1,835)	1:A:111:LEU:HD12	1:A:114:MET:HE3	10	0.02
(1,835)	1:A:111:LEU:HD13	1:A:114:MET:HE1	10	0.02
(1,835)	1:A:111:LEU:HD13	1:A:114:MET:HE2	10	0.02
(1,835)	1:A:111:LEU:HD13	1:A:114:MET:HE3	10	0.02
(1,835)	1:A:111:LEU:HD11	1:A:114:MET:HE1	14	0.02
(1,835)	1:A:111:LEU:HD11	1:A:114:MET:HE2	14	0.02
(1,835)	1:A:111:LEU:HD11	1:A:114:MET:HE3	14	0.02
(1,835)	1:A:111:LEU:HD12	1:A:114:MET:HE1	14	0.02
(1,835)	1:A:111:LEU:HD12	1:A:114:MET:HE2	14	0.02
(1,835)	1:A:111:LEU:HD12	1:A:114:MET:HE3	14	0.02
(1,835)	1:A:111:LEU:HD13	1:A:114:MET:HE1	14	0.02
(1,835)	1:A:111:LEU:HD13	1:A:114:MET:HE2	14	0.02
(1,835)	1:A:111:LEU:HD13	1:A:114:MET:HE3	14	0.02
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD21	13	0.02
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD22	13	0.02
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD23	13	0.02
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD21	18	0.02
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD22	18	0.02
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD23	18	0.02
(1,817)	1:A:101:HIS:HB2	1:A:103:LEU:HG	14	0.02
(1,817)	1:A:101:HIS:HB3	1:A:103:LEU:HG	14	0.02
(1,813)	1:A:96:THR:HG21	1:A:103:LEU:HD21	17	0.02
(1,813)	1:A:96:THR:HG21	1:A:103:LEU:HD22	17	0.02
(1,813)	1:A:96:THR:HG21	1:A:103:LEU:HD23	17	0.02
(1,813)	1:A:96:THR:HG22	1:A:103:LEU:HD21	17	0.02
(1,813)	1:A:96:THR:HG22	1:A:103:LEU:HD22	17	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,813)	1:A:96:THR:HG22	1:A:103:LEU:HD23	17	0.02
(1,813)	1:A:96:THR:HG23	1:A:103:LEU:HD21	17	0.02
(1,813)	1:A:96:THR:HG23	1:A:103:LEU:HD22	17	0.02
(1,813)	1:A:96:THR:HG23	1:A:103:LEU:HD23	17	0.02
(1,799)	1:A:93:LEU:HD21	1:A:119:GLU:HB2	19	0.02
(1,799)	1:A:93:LEU:HD21	1:A:119:GLU:HB3	19	0.02
(1,799)	1:A:93:LEU:HD22	1:A:119:GLU:HB2	19	0.02
(1,799)	1:A:93:LEU:HD22	1:A:119:GLU:HB3	19	0.02
(1,799)	1:A:93:LEU:HD23	1:A:119:GLU:HB2	19	0.02
(1,799)	1:A:93:LEU:HD23	1:A:119:GLU:HB3	19	0.02
(1,768)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:119:GLU:HG2	3	0.02
(1,768)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:119:GLU:HG3	3	0.02
(1,768)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:119:GLU:HG2	3	0.02
(1,768)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:119:GLU:HG3	3	0.02
(1,768)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:119:GLU:HG2	3	0.02
(1,768)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:119:GLU:HG3	3	0.02
(1,768)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:119:GLU:HG2	9	0.02
(1,768)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:119:GLU:HG3	9	0.02
(1,768)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:119:GLU:HG2	9	0.02
(1,768)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:119:GLU:HG3	9	0.02
(1,768)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:119:GLU:HG2	9	0.02
(1,768)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:119:GLU:HG3	9	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB1	1:A:114:MET:HE1	5	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB1	1:A:114:MET:HE2	5	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB1	1:A:114:MET:HE3	5	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB2	1:A:114:MET:HE1	5	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB2	1:A:114:MET:HE2	5	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB2	1:A:114:MET:HE3	5	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB3	1:A:114:MET:HE1	5	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB3	1:A:114:MET:HE2	5	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB3	1:A:114:MET:HE3	5	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB1	1:A:114:MET:HE1	12	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB1	1:A:114:MET:HE2	12	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB1	1:A:114:MET:HE3	12	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB2	1:A:114:MET:HE1	12	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB2	1:A:114:MET:HE2	12	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB2	1:A:114:MET:HE3	12	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB3	1:A:114:MET:HE1	12	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB3	1:A:114:MET:HE2	12	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB3	1:A:114:MET:HE3	12	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB1	1:A:114:MET:HE1	13	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB1	1:A:114:MET:HE2	13	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,757)	1:A:88:ALA:HB1	1:A:114:MET:HE3	13	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB2	1:A:114:MET:HE1	13	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB2	1:A:114:MET:HE2	13	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB2	1:A:114:MET:HE3	13	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB3	1:A:114:MET:HE1	13	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB3	1:A:114:MET:HE2	13	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB3	1:A:114:MET:HE3	13	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB1	1:A:114:MET:HE1	20	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB1	1:A:114:MET:HE2	20	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB1	1:A:114:MET:HE3	20	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB2	1:A:114:MET:HE1	20	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB2	1:A:114:MET:HE2	20	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB2	1:A:114:MET:HE3	20	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB3	1:A:114:MET:HE1	20	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB3	1:A:114:MET:HE2	20	0.02
(1,757)	1:A:88:ALA:HB3	1:A:114:MET:HE3	20	0.02
(1,751)	1:A:63:LEU:HD11	1:A:111:LEU:HB2	9	0.02
(1,751)	1:A:63:LEU:HD11	1:A:111:LEU:HB3	9	0.02
(1,751)	1:A:63:LEU:HD12	1:A:111:LEU:HB2	9	0.02
(1,751)	1:A:63:LEU:HD12	1:A:111:LEU:HB3	9	0.02
(1,751)	1:A:63:LEU:HD13	1:A:111:LEU:HB2	9	0.02
(1,751)	1:A:63:LEU:HD13	1:A:111:LEU:HB3	9	0.02
(1,751)	1:A:63:LEU:HD11	1:A:111:LEU:HB2	12	0.02
(1,751)	1:A:63:LEU:HD11	1:A:111:LEU:HB3	12	0.02
(1,751)	1:A:63:LEU:HD12	1:A:111:LEU:HB2	12	0.02
(1,751)	1:A:63:LEU:HD12	1:A:111:LEU:HB3	12	0.02
(1,751)	1:A:63:LEU:HD13	1:A:111:LEU:HB2	12	0.02
(1,751)	1:A:63:LEU:HD13	1:A:111:LEU:HB3	12	0.02
(1,750)	1:A:63:LEU:HB2	1:A:88:ALA:HB1	11	0.02
(1,750)	1:A:63:LEU:HB2	1:A:88:ALA:HB2	11	0.02
(1,750)	1:A:63:LEU:HB2	1:A:88:ALA:HB3	11	0.02
(1,750)	1:A:63:LEU:HB3	1:A:88:ALA:HB1	11	0.02
(1,750)	1:A:63:LEU:HB3	1:A:88:ALA:HB2	11	0.02
(1,750)	1:A:63:LEU:HB3	1:A:88:ALA:HB3	11	0.02
(1,75)	1:A:87:ASN:HA	1:A:88:ALA:H	8	0.02
(1,739)	1:A:61:ALA:HB1	1:A:114:MET:HE1	5	0.02
(1,739)	1:A:61:ALA:HB1	1:A:114:MET:HE2	5	0.02
(1,739)	1:A:61:ALA:HB1	1:A:114:MET:HE3	5	0.02
(1,739)	1:A:61:ALA:HB2	1:A:114:MET:HE1	5	0.02
(1,739)	1:A:61:ALA:HB2	1:A:114:MET:HE2	5	0.02
(1,739)	1:A:61:ALA:HB2	1:A:114:MET:HE3	5	0.02
(1,739)	1:A:61:ALA:HB3	1:A:114:MET:HE1	5	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,739)	1:A:61:ALA:HB3	1:A:114:MET:HE2	5	0.02
(1,739)	1:A:61:ALA:HB3	1:A:114:MET:HE3	5	0.02
(1,722)	1:A:57:LEU:HB2	1:A:111:LEU:HD11	18	0.02
(1,722)	1:A:57:LEU:HB2	1:A:111:LEU:HD12	18	0.02
(1,722)	1:A:57:LEU:HB2	1:A:111:LEU:HD13	18	0.02
(1,722)	1:A:57:LEU:HB3	1:A:111:LEU:HD11	18	0.02
(1,722)	1:A:57:LEU:HB3	1:A:111:LEU:HD12	18	0.02
(1,722)	1:A:57:LEU:HB3	1:A:111:LEU:HD13	18	0.02
(1,719)	1:A:54:ALA:HB1	1:A:110:PRO:HG2	9	0.02
(1,719)	1:A:54:ALA:HB1	1:A:110:PRO:HG3	9	0.02
(1,719)	1:A:54:ALA:HB2	1:A:110:PRO:HG2	9	0.02
(1,719)	1:A:54:ALA:HB2	1:A:110:PRO:HG3	9	0.02
(1,719)	1:A:54:ALA:HB3	1:A:110:PRO:HG2	9	0.02
(1,719)	1:A:54:ALA:HB3	1:A:110:PRO:HG3	9	0.02
(1,715)	1:A:53:THR:HG21	1:A:55:SER:HG	11	0.02
(1,715)	1:A:53:THR:HG22	1:A:55:SER:HG	11	0.02
(1,715)	1:A:53:THR:HG23	1:A:55:SER:HG	11	0.02
(1,715)	1:A:53:THR:HG21	1:A:55:SER:HG	12	0.02
(1,715)	1:A:53:THR:HG22	1:A:55:SER:HG	12	0.02
(1,715)	1:A:53:THR:HG23	1:A:55:SER:HG	12	0.02
(1,713)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:56:LEU:HD21	3	0.02
(1,713)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:56:LEU:HD22	3	0.02
(1,713)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:56:LEU:HD23	3	0.02
(1,713)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:56:LEU:HD21	3	0.02
(1,713)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:56:LEU:HD22	3	0.02
(1,713)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:56:LEU:HD23	3	0.02
(1,713)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:56:LEU:HD21	3	0.02
(1,713)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:56:LEU:HD22	3	0.02
(1,713)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:56:LEU:HD23	3	0.02
(1,713)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:56:LEU:HD21	15	0.02
(1,713)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:56:LEU:HD22	15	0.02
(1,713)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:56:LEU:HD23	15	0.02
(1,713)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:56:LEU:HD21	15	0.02
(1,713)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:56:LEU:HD22	15	0.02
(1,713)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:56:LEU:HD23	15	0.02
(1,713)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:56:LEU:HD21	15	0.02
(1,713)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:56:LEU:HD22	15	0.02
(1,713)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:56:LEU:HD23	15	0.02
(1,704)	1:A:52:ILE:HB	1:A:56:LEU:HD11	4	0.02
(1,704)	1:A:52:ILE:HB	1:A:56:LEU:HD12	4	0.02
(1,704)	1:A:52:ILE:HB	1:A:56:LEU:HD13	4	0.02
(1,702)	1:A:49:PRO:HB2	1:A:98:ARG:HB2	15	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,702)	1:A:49:PRO:HB2	1:A:98:ARG:HB3	15	0.02
(1,702)	1:A:49:PRO:HB3	1:A:98:ARG:HB2	15	0.02
(1,702)	1:A:49:PRO:HB3	1:A:98:ARG:HB3	15	0.02
(1,702)	1:A:49:PRO:HB2	1:A:98:ARG:HB2	19	0.02
(1,702)	1:A:49:PRO:HB2	1:A:98:ARG:HB3	19	0.02
(1,702)	1:A:49:PRO:HB3	1:A:98:ARG:HB2	19	0.02
(1,702)	1:A:49:PRO:HB3	1:A:98:ARG:HB3	19	0.02
(1,700)	1:A:49:PRO:HB2	1:A:96:THR:HB	6	0.02
(1,700)	1:A:49:PRO:HB3	1:A:96:THR:HB	6	0.02
(1,695)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:56:LEU:HD11	15	0.02
(1,695)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:56:LEU:HD12	15	0.02
(1,695)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:56:LEU:HD13	15	0.02
(1,695)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:56:LEU:HD11	15	0.02
(1,695)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:56:LEU:HD12	15	0.02
(1,695)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:56:LEU:HD13	15	0.02
(1,695)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:56:LEU:HD11	15	0.02
(1,695)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:56:LEU:HD12	15	0.02
(1,695)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:56:LEU:HD13	15	0.02
(1,695)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:56:LEU:HD11	16	0.02
(1,695)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:56:LEU:HD12	16	0.02
(1,695)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:56:LEU:HD13	16	0.02
(1,695)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:56:LEU:HD11	16	0.02
(1,695)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:56:LEU:HD12	16	0.02
(1,695)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:56:LEU:HD13	16	0.02
(1,695)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:56:LEU:HD11	16	0.02
(1,695)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:56:LEU:HD12	16	0.02
(1,695)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:56:LEU:HD13	16	0.02
(1,686)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:51:ASP:HB2	1	0.02
(1,686)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:51:ASP:HB2	1	0.02
(1,686)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:51:ASP:HB2	1	0.02
(1,686)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:51:ASP:HB2	9	0.02
(1,686)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:51:ASP:HB2	9	0.02
(1,686)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:51:ASP:HB2	9	0.02
(1,686)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:51:ASP:HB2	15	0.02
(1,686)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:51:ASP:HB2	15	0.02
(1,686)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:51:ASP:HB2	15	0.02
(1,676)	1:A:44:TRP:HZ3	1:A:145:LEU:HD21	1	0.02
(1,676)	1:A:44:TRP:HZ3	1:A:145:LEU:HD22	1	0.02
(1,676)	1:A:44:TRP:HZ3	1:A:145:LEU:HD23	1	0.02
(1,676)	1:A:44:TRP:HZ3	1:A:145:LEU:HD21	18	0.02
(1,676)	1:A:44:TRP:HZ3	1:A:145:LEU:HD22	18	0.02
(1,676)	1:A:44:TRP:HZ3	1:A:145:LEU:HD23	18	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,663)	1:A:44:TRP:HH2	1:A:46:VAL:HG11	14	0.02
(1,663)	1:A:44:TRP:HH2	1:A:46:VAL:HG12	14	0.02
(1,663)	1:A:44:TRP:HH2	1:A:46:VAL:HG13	14	0.02
(1,653)	1:A:44:TRP:HD1	1:A:56:LEU:HD21	14	0.02
(1,653)	1:A:44:TRP:HD1	1:A:56:LEU:HD22	14	0.02
(1,653)	1:A:44:TRP:HD1	1:A:56:LEU:HD23	14	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG21	1	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG22	1	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG23	1	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG21	1	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG22	1	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG23	1	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG21	1	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG22	1	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG23	1	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG21	2	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG22	2	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG23	2	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG21	2	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG22	2	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG23	2	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG21	2	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG22	2	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG23	2	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG21	5	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG22	5	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG23	5	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG21	5	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG22	5	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG23	5	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG21	5	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG22	5	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG23	5	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG21	7	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG22	7	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG23	7	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG21	7	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG22	7	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG23	7	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG21	7	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG22	7	0.02
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG23	7	0.02



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

(1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG21         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG22         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG23         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG21         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG22         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG21         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG22         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG22         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG23         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG21         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG22         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG21         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG22         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3	(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG21	11	0.02
(1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG21         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG22         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG23         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG21         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG22         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3	(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG22	11	0.02
(1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG22         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG23         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG21         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG22         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG22         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3	(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG23	11	0.02
(1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG23         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG21         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG22         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG22         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3	(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG21	11	0.02
(1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG21         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG22         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG22         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:32:ALA:HB3	(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG22	11	0.02
(1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG22         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG22         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG22         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,649)         1:A:32:ALA:HB3	(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG23	11	0.02
(1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         11         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG22         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG22         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB2         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB2	(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG21	11	0.02
(1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG22         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG22         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG22         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB2         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3	(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG22	11	0.02
(1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG22         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG22         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG22         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG22         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:44:TRP:HB2         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3	(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG23	11	0.02
(1,648)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG22         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG221         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB2         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB1         <	(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG21	17	0.02
(1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG22         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG22         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB23         17         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:44:TRP:HB2         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:145:LEU:HD21         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB2         1	(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG22	17	0.02
(1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG22         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG22         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB2         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:145:LEU:HD21         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB2         1:	(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG23	17	0.02
(1,648)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG22         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB2         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:145:LEU:HD21         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:	(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG21	17	0.02
(1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG21         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG22         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB2         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:145:LEU:HD22         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:145:LEU:HD23         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:14	(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG22	17	0.02
(1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG22         17         0.02           (1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:44:TRP:HB2         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:44:TRP:HB2         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:145:LEU:HD21         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:145:LEU:HD23         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:145:LEU:HD21         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:14	(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG23	17	0.02
(1,648)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:141:VAL:HG23         17         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:44:TRP:HB2         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:44:TRP:HB2         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:145:LEU:HD21         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:145:LEU:HD23         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:145:LEU:HD23         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:145:LEU:HD21         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:14	(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG21	17	0.02
(1,626)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:44:TRP:HB2         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:44:TRP:HB2         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:145:LEU:HD21         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:145:LEU:HD23         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:145:LEU:HD21         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:145:LEU:HD23         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:145:LEU:HD23         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:145:LEU:HD23         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:	(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG22	17	0.02
(1,626)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:44:TRP:HB2         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:45:LEU:HD21         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:145:LEU:HD22         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:145:LEU:HD23         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:145:LEU:HD21         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:145:LEU:HD22         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:145	/	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG23	17	0.02
(1,626)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:44:TRP:HB2         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB2         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:145:LEU:HD21         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:145:LEU:HD22         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:145:LEU:HD23         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:145:LEU:HD21         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:145:LEU:HD23         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:145:LEU:HD21         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:145:LEU:HD21         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:145:LEU:HD22         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:145:LEU:HD23         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3 <t< td=""><td>(1,626)</td><td>1:A:32:ALA:HB1</td><td>1:A:44:TRP:HB2</td><td>13</td><td>0.02</td></t<>	(1,626)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:44:TRP:HB2	13	0.02
(1,626)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB2         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:145:LEU:HD21         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:145:LEU:HD22         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:145:LEU:HD23         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:145:LEU:HD21         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:145:LEU:HD23         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:145:LEU:HD21         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:145:LEU:HD22         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:145:LEU:HD22         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:145:LEU:HD23         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:145:LEU:HD23         13         0.02	(1,626)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:44:TRP:HB3	13	0.02
(1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB2         13         0.02           (1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:145:LEU:HD21         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:145:LEU:HD22         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:145:LEU:HD23         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:145:LEU:HD21         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:145:LEU:HD22         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:145:LEU:HD21         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:145:LEU:HD21         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:145:LEU:HD22         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:145:LEU:HD23         13         0.02           (1,620)         1:A:32:PHE:HE1         1:A:41:VAL:HB         1         0.02	(1,626)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:44:TRP:HB2	13	0.02
(1,626)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:44:TRP:HB3         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:145:LEU:HD21         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:145:LEU:HD22         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:145:LEU:HD23         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:145:LEU:HD21         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:145:LEU:HD22         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:145:LEU:HD23         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:145:LEU:HD21         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:145:LEU:HD22         13         0.02           (1,620)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:145:LEU:HD23         13         0.02           (1,620)         1:A:32:PHE:HE1         1:A:41:VAL:HB         1         0.02	(1,626)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:44:TRP:HB3	13	0.02
(1,620)       1:A:32:ALA:HB1       1:A:145:LEU:HD21       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB1       1:A:145:LEU:HD22       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB1       1:A:145:LEU:HD23       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB2       1:A:145:LEU:HD21       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB2       1:A:145:LEU:HD22       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB2       1:A:145:LEU:HD23       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:145:LEU:HD21       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:145:LEU:HD22       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:145:LEU:HD23       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:145:LEU:HD23       13       0.02         (1,614)       1:A:29:PHE:HE1       1:A:41:VAL:HB       1       0.02	(1,626)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:44:TRP:HB2	13	0.02
(1,620)       1:A:32:ALA:HB1       1:A:145:LEU:HD22       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB1       1:A:145:LEU:HD23       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB2       1:A:145:LEU:HD21       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB2       1:A:145:LEU:HD22       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB2       1:A:145:LEU:HD23       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:145:LEU:HD21       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:145:LEU:HD22       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:145:LEU:HD23       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:145:LEU:HD23       13       0.02         (1,614)       1:A:29:PHE:HE1       1:A:41:VAL:HB       1       0.02	(1,626)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:44:TRP:HB3	13	0.02
(1,620)       1:A:32:ALA:HB1       1:A:145:LEU:HD23       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB2       1:A:145:LEU:HD21       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB2       1:A:145:LEU:HD22       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB2       1:A:145:LEU:HD23       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:145:LEU:HD21       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:145:LEU:HD22       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:145:LEU:HD23       13       0.02         (1,614)       1:A:29:PHE:HE1       1:A:41:VAL:HB       1       0.02	(1,620)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:145:LEU:HD21	13	0.02
(1,620)       1:A:32:ALA:HB2       1:A:145:LEU:HD21       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB2       1:A:145:LEU:HD22       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB2       1:A:145:LEU:HD23       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:145:LEU:HD21       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:145:LEU:HD22       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:145:LEU:HD23       13       0.02         (1,614)       1:A:29:PHE:HE1       1:A:41:VAL:HB       1       0.02	(1,620)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:145:LEU:HD22	13	0.02
(1,620)       1:A:32:ALA:HB2       1:A:145:LEU:HD22       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB2       1:A:145:LEU:HD23       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:145:LEU:HD21       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:145:LEU:HD22       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:145:LEU:HD23       13       0.02         (1,614)       1:A:29:PHE:HE1       1:A:41:VAL:HB       1       0.02	(1,620)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:145:LEU:HD23	13	0.02
(1,620)       1:A:32:ALA:HB2       1:A:145:LEU:HD23       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:145:LEU:HD21       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:145:LEU:HD22       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:145:LEU:HD23       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:145:LEU:HD23       13       0.02         (1,614)       1:A:29:PHE:HE1       1:A:41:VAL:HB       1       0.02	(1,620)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:145:LEU:HD21	13	0.02
(1,620)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:145:LEU:HD21       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:145:LEU:HD22       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:145:LEU:HD23       13       0.02         (1,614)       1:A:29:PHE:HE1       1:A:41:VAL:HB       1       0.02	(1,620)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:145:LEU:HD22	13	0.02
(1,620)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:145:LEU:HD22       13       0.02         (1,620)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:145:LEU:HD23       13       0.02         (1,614)       1:A:29:PHE:HE1       1:A:41:VAL:HB       1       0.02	(1,620)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:145:LEU:HD23	13	0.02
(1,620)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:145:LEU:HD23       13       0.02         (1,614)       1:A:29:PHE:HE1       1:A:41:VAL:HB       1       0.02	(1,620)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:145:LEU:HD21	13	0.02
(1,614) 1:A:29:PHE:HE1 1:A:41:VAL:HB 1 0.02	(1,620)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:145:LEU:HD22	13	0.02
(1,614) 1:A:29:PHE:HE1 1:A:41:VAL:HB 1 0.02	` ,	1:A:32:ALA:HB3	1:A:145:LEU:HD23	13	0.02
	· · /	1:A:29:PHE:HE1	1:A:41:VAL:HB	1	0.02
(1,014)   1.A.25.1 III.11122   1.A.41. VAL.11D   1   0.02	(1,614)	1:A:29:PHE:HE2	1:A:41:VAL:HB	1	0.02
(1,614) 1:A:29:PHE:HE1 1:A:41:VAL:HB 17 0.02	· · /	1:A:29:PHE:HE1	1:A:41:VAL:HB	17	0.02
(1,614) 1:A:29:PHE:HE2 1:A:41:VAL:HB 17 0.02	_ ` /	1:A:29:PHE:HE2	1:A:41:VAL:HB	17	0.02
(1,597) 1:A:24:VAL:HB 1:A:29:PHE:HE1 8 0.02	, ,	1:A:24:VAL:HB	1:A:29:PHE:HE1	8	0.02
(1,597) 1:A:24:VAL:HB 1:A:29:PHE:HE2 8 0.02		1:A:24:VAL:HB	1:A:29:PHE:HE2	8	0.02
(1,575) 1:A:16:ALA:HB1 1:A:23:GLU:HB2 2 0.02		1:A:16:ALA:HB1	1:A:23:GLU:HB2	2	0.02
(1,575) 1:A:16:ALA:HB1 1:A:23:GLU:HB3 2 0.02	(1,575)	1:A:16:ALA:HB1	1:A:23:GLU:HB3	2	0.02
(1,575) 1:A:16:ALA:HB2 1:A:23:GLU:HB2 2 0.02		1:A:16:ALA:HB2	1:A:23:GLU:HB2	2	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,575)	1:A:16:ALA:HB2	1:A:23:GLU:HB3	2	0.02
(1,575)	1:A:16:ALA:HB3	1:A:23:GLU:HB2	2	0.02
(1,575)	1:A:16:ALA:HB3	1:A:23:GLU:HB3	2	0.02
(1,575)	1:A:16:ALA:HB1	1:A:23:GLU:HB2	4	0.02
(1,575)	1:A:16:ALA:HB1	1:A:23:GLU:HB3	4	0.02
(1,575)	1:A:16:ALA:HB2	1:A:23:GLU:HB2	4	0.02
(1,575)	1:A:16:ALA:HB2	1:A:23:GLU:HB3	4	0.02
(1,575)	1:A:16:ALA:HB3	1:A:23:GLU:HB2	4	0.02
(1,575)	1:A:16:ALA:HB3	1:A:23:GLU:HB3	4	0.02
(1,575)	1:A:16:ALA:HB1	1:A:23:GLU:HB2	6	0.02
(1,575)	1:A:16:ALA:HB1	1:A:23:GLU:HB3	6	0.02
(1,575)	1:A:16:ALA:HB2	1:A:23:GLU:HB2	6	0.02
(1,575)	1:A:16:ALA:HB2	1:A:23:GLU:HB3	6	0.02
(1,575)	1:A:16:ALA:HB3	1:A:23:GLU:HB2	6	0.02
(1,575)	1:A:16:ALA:HB3	1:A:23:GLU:HB3	6	0.02
(1,575)	1:A:16:ALA:HB1	1:A:23:GLU:HB2	18	0.02
(1,575)	1:A:16:ALA:HB1	1:A:23:GLU:HB3	18	0.02
(1,575)	1:A:16:ALA:HB2	1:A:23:GLU:HB2	18	0.02
(1,575)	1:A:16:ALA:HB2	1:A:23:GLU:HB3	18	0.02
(1,575)	1:A:16:ALA:HB3	1:A:23:GLU:HB2	18	0.02
(1,575)	1:A:16:ALA:HB3	1:A:23:GLU:HB3	18	0.02
(1,575)	1:A:16:ALA:HB1	1:A:23:GLU:HB2	20	0.02
(1,575)	1:A:16:ALA:HB1	1:A:23:GLU:HB3	20	0.02
(1,575)	1:A:16:ALA:HB2	1:A:23:GLU:HB2	20	0.02
(1,575)	1:A:16:ALA:HB2	1:A:23:GLU:HB3	20	0.02
(1,575)	1:A:16:ALA:HB3	1:A:23:GLU:HB2	20	0.02
(1,575)	1:A:16:ALA:HB3	1:A:23:GLU:HB3	20	0.02
(1,558)	1:A:13:THR:HB	1:A:15:THR:HG21	5	0.02
(1,558)	1:A:13:THR:HB	1:A:15:THR:HG22	5	0.02
(1,558)	1:A:13:THR:HB	1:A:15:THR:HG23	5	0.02
(1,558)	1:A:13:THR:HB	1:A:15:THR:HG21	11	0.02
(1,558)	1:A:13:THR:HB	1:A:15:THR:HG22	11	0.02
(1,558)	1:A:13:THR:HB	1:A:15:THR:HG23	11	0.02
(1,558)	1:A:13:THR:HB	1:A:15:THR:HG21	15	0.02
(1,558)	1:A:13:THR:HB	1:A:15:THR:HG22	15	0.02
(1,558)	1:A:13:THR:HB	1:A:15:THR:HG23	15	0.02
(1,547)	1:A:132:ILE:HG21	1:A:136:GLU:HA	12	0.02
(1,547)	1:A:132:ILE:HG22	1:A:136:GLU:HA	12	0.02
(1,547)	1:A:132:ILE:HG23	1:A:136:GLU:HA	12	0.02
(1,535)	1:A:119:GLU:HA	1:A:121:MET:HE1	20	0.02
(1,535)	1:A:119:GLU:HA	1:A:121:MET:HE2	20	0.02
(1,535)	1:A:119:GLU:HA	1:A:121:MET:HE3	20	0.02



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

(1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21         6         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD22         6         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21         7         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD22         7         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD23         7         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:124:GLN:HA         16         0.02           (1,479)         1:A:17:TYR:HD1         1:A:124:GLN:HA         16         0.02           (1,450)         1:A:17:TYR:HB2         1:A:124:GLN:HA         16         0.02           (1,449)         1:A:17:TYR:HB3         1:A:22:ILE:HA         9         0.02           (1,449)         1:A:17:TYR:HB3         1:A:22:ILE:HA         15         0.02           (1,449)         1:A:17:TYR:HB3         1:A:22:ILE:HA         15         0.02           (1,449)         1:A:17:TYR:HB3         1:A:21:IR:HB         4         0.02           (1,449)         1:A:16:VAL:HG21         1         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         1         0.02<	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,479) 1:A:48:ARG:HA 1:A:145:LEU:HD23 6 0.02 (1,479) 1:A:48:ARG:HA 1:A:145:LEU:HD21 7 0.02 (1,479) 1:A:48:ARG:HA 1:A:145:LEU:HD22 7 0.02 (1,479) 1:A:48:ARG:HA 1:A:145:LEU:HD23 7 0.02 (1,450) 1:A:17:TYR:HD1 1:A:124:GLN:HA 16 0.02 (1,450) 1:A:17:TYR:HD2 1:A:124:GLN:HA 16 0.02 (1,450) 1:A:17:TYR:HD2 1:A:124:GLN:HA 16 0.02 (1,449) 1:A:17:TYR:HB2 1:A:22:ILE:HA 9 0.02 (1,449) 1:A:17:TYR:HB3 1:A:22:ILE:HA 9 0.02 (1,449) 1:A:17:TYR:HB3 1:A:22:ILE:HA 15 0.02 (1,449) 1:A:18:R:HB3 1:A:22:ILE:HA 15 0.02 (1,449) 1:A:18:R:HB3 1:A:16:VAL:HG21 1 0.02 (1,415) 1:A:88:ALA:H 1:A:116:VAL:HG21 1 0.02 (1,415) 1:A:88:ALA:H 1:A:116:VAL:HG21 1 0.02 (1,415) 1:A:88:ALA:H 1:A:116:VAL:HG22 1 0.02 (1,415) 1:A:88:ALA:H 1:A:116:VAL:HG23 1 0.02 (1,415) 1:A:88:ALA:H 1:A:116:VAL:HG23 1 0.02 (1,415) 1:A:88:ALA:H 1:A:116:VAL:HG23 13 0.02 (1,415) 1:A:88:ALA:H 1:A:116:VAL:HG21 17 0.02 (1,415) 1:A:88:ALA:H 1:A:116:VAL:HG23 13 0.02 (1,413) 1:A:53:THR:H 1:A:56:LEU:HD11 6 0.02 (1,413) 1:A:53:THR:H 1:A:56:LEU:HD11 8 0.02 (1,393) 1:A:96:THR:HG23 1:A:101:HIS:H 1 0.02 (1,393) 1:A:96:THR:HG23 1:A:101:HIS:H 1 0.02 (1,374) 1:A:36:ALA:HB3 1:A:140:VAL:H 14 0.02 (1,374) 1:A:36:ALA:HB3 1:A:140:VAL:H 14 0.02 (1,374) 1:A:36:ALA:HB3 1:A:140:VAL:H 14 0.02 (1,365) 1:A:14:VAL:HG23 1:A:101:HIS:H 1 0.02 (1,365) 1:A:14:VAL:HG23 1:A:23:GLU:H 5 0.02 (1,365) 1:A:14:VAL:HG23 1:A:23:GLU:H 5 0.02 (1,365) 1:A:14:	(1,479)	1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD21	6	0.02
(1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21         7         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD22         7         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD23         7         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:124:GLN:HA         16         0.02           (1,450)         1:A:17:TYR:HD1         1:A:124:GLN:HA         16         0.02           (1,450)         1:A:17:TYR:HB2         1:A:22:ILE:HA         9         0.02           (1,449)         1:A:17:TYR:HB3         1:A:22:ILE:HA         9         0.02           (1,449)         1:A:17:TYR:HB3         1:A:22:ILE:HA         15         0.02           (1,4415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         1         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23	(1,479)	1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD22	6	0.02
(1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD22         7         0.02           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD23         7         0.02           (1,450)         1:A:17:TYR:HD1         1:A:124:GLN:HA         16         0.02           (1,450)         1:A:17:TYR:HD2         1:A:124:GLN:HA         16         0.02           (1,449)         1:A:17:TYR:HB2         1:A:22:ILE:HA         9         0.02           (1,449)         1:A:17:TYR:HB3         1:A:22:ILE:HA         9         0.02           (1,449)         1:A:17:TYR:HB3         1:A:22:ILE:HA         15         0.02           (1,449)         1:A:37:TYR:HB3         1:A:22:ILE:HA         15         0.02           (1,449)         1:A:48:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         1         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         1         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21	(1,479)	1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD23	6	0.02
(1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD23         7         0.02           (1,450)         1:A:17:TYR:HD1         1:A:124:GLN:HA         16         0.02           (1,450)         1:A:17:TYR:HD2         1:A:124:GLN:HA         16         0.02           (1,449)         1:A:17:TYR:HB2         1:A:22:ILE:HA         9         0.02           (1,449)         1:A:17:TYR:HB3         1:A:22:ILE:HA         9         0.02           (1,449)         1:A:17:TYR:HB3         1:A:22:ILE:HA         15         0.02           (1,449)         1:A:47:TYR:HB3         1:A:22:ILE:HA         15         0.02           (1,4415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         1         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23	(1,479)	1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD21	7	0.02
(1,450)         1:A:17:TYR:HD1         1:A:124:GLN:HA         16         0.02           (1,450)         1:A:17:TYR:HD2         1:A:124:GLN:HA         16         0.02           (1,449)         1:A:17:TYR:HB2         1:A:22:ILE:HA         9         0.02           (1,449)         1:A:17:TYR:HB3         1:A:22:ILE:HA         9         0.02           (1,449)         1:A:17:TYR:HB3         1:A:22:ILE:HA         15         0.02           (1,449)         1:A:17:TYR:HB3         1:A:22:ILE:HA         15         0.02           (1,449)         1:A:17:TYR:HB3         1:A:22:ILE:HA         15         0.02           (1,449)         1:A:76:TYR:HB3         1:A:22:ILE:HA         15         0.02           (1,449)         1:A:77:TYR:HB3         1:A:22:ILE:HA         15         0.02           (1,449)         1:A:17:TYR:HB3         1:A:22:ILE:HA         15         0.02           (1,449)         1:A:48:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         1         0.02           (1,445)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         1         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23	(1,479)	1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD22	7	0.02
(1,450)         1:A:17:TYR:HD2         1:A:124:GLN:HA         16         0.02           (1,449)         1:A:17:TYR:HB2         1:A:22:ILE:HA         9         0.02           (1,449)         1:A:17:TYR:HB3         1:A:22:ILE:HA         9         0.02           (1,449)         1:A:17:TYR:HB2         1:A:22:ILE:HA         15         0.02           (1,449)         1:A:17:TYR:HB3         1:A:22:ILE:HA         15         0.02           (1,448)         1:A:47:TYR:HB3         1:A:22:ILE:HA         15         0.02           (1,448)         1:A:47:TYR:HB3         1:A:22:ILE:HA         15         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         1         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         <	(1,479)	1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD23	7	0.02
(1,449)         1:A:17:TYR:HB2         1:A:22:ILE:HA         9         0.02           (1,449)         1:A:17:TYR:HB3         1:A:22:ILE:HA         9         0.02           (1,449)         1:A:17:TYR:HB2         1:A:22:ILE:HA         15         0.02           (1,449)         1:A:17:TYR:HB3         1:A:22:ILE:HA         15         0.02           (1,449)         1:A:47:TYR:HB3         1:A:22:ILE:HA         15         0.02           (1,445)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         1         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23	(1,450)	1:A:17:TYR:HD1	1:A:124:GLN:HA	16	0.02
(1,449) 1:A:17:TYR:HB3 1:A:22:ILE:HA 9 0.02 (1,449) 1:A:17:TYR:HB2 1:A:22:ILE:HA 15 0.02 (1,449) 1:A:17:TYR:HB3 1:A:22:ILE:HA 15 0.02 (1,449) 1:A:17:TYR:HB3 1:A:22:ILE:HA 15 0.02 (1,428) 1:A:97:GLY:H 1:A:123:THR:HB 4 0.02 (1,415) 1:A:88:ALA:H 1:A:116:VAL:HG21 1 0.02 (1,415) 1:A:88:ALA:H 1:A:116:VAL:HG22 1 0.02 (1,415) 1:A:88:ALA:H 1:A:116:VAL:HG23 1 0.02 (1,415) 1:A:88:ALA:H 1:A:116:VAL:HG23 1 0.02 (1,415) 1:A:88:ALA:H 1:A:116:VAL:HG21 13 0.02 (1,415) 1:A:88:ALA:H 1:A:116:VAL:HG21 13 0.02 (1,415) 1:A:88:ALA:H 1:A:116:VAL:HG22 13 0.02 (1,415) 1:A:88:ALA:H 1:A:116:VAL:HG23 13 0.02 (1,415) 1:A:88:ALA:H 1:A:116:VAL:HG23 17 0.02 (1,415) 1:A:88:ALA:H 1:A:116:VAL:HG21 17 0.02 (1,415) 1:A:53:THR:H 1:A:56:LEU:HD11 6 0.02 (1,413) 1:A:53:THR:H 1:A:56:LEU:HD11 6 0.02 (1,413) 1:A:53:THR:H 1:A:56:LEU:HD11 8 0.02 (1,413) 1:A:53:THR:H 1:A:56:LEU:HD12 8 0.02 (1,413) 1:A:53:THR:H 1:A:56:LEU:HD13 8 0.02 (1,413) 1:A:66:THR:HG21 1:A:101:HIS:H 1 0.02 (1,393) 1:A:96:THR:HG22 1:A:101:HIS:H 1 0.02 (1,393) 1:A:96:THR:HG23 1:A:101:HIS:H 1 0.02 (1,393) 1:A:96:THR:HG23 1:A:101:HIS:H 1 0.02 (1,374) 1:A:36:ALA:HB3 1:A:140:VAL:H 14 0.02 (1,374) 1:A:36:ALA:HB3 1:A:140:VAL:H 14 0.02 (1,374) 1:A:36:ALA:HB3 1:A:140:VAL:H 14 0.02 (1,365) 1:A:14:VAL:HG21 1:A:23:GLU:H 5 0.02 (1,365) 1:A:14:VAL:HG23 1:A:23:GLU:H 5 0.02	(1,450)	1:A:17:TYR:HD2	1:A:124:GLN:HA	16	0.02
(1,449)         1:A:17:TYR:HB2         1:A:22:ILE:HA         15         0.02           (1,449)         1:A:17:TYR:HB3         1:A:22:ILE:HA         15         0.02           (1,428)         1:A:97:GLY:H         1:A:123:THR:HB         4         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         1         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         1         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         1         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23	(1,449)	1:A:17:TYR:HB2	1:A:22:ILE:HA	9	0.02
(1,449)         1:A:17:TYR:HB3         1:A:22:ILE:HA         15         0.02           (1,428)         1:A:97:GLY:H         1:A:123:THR:HB         4         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         1         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         1         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         1         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         17         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD11	(1,449)	1:A:17:TYR:HB3	1:A:22:ILE:HA	9	0.02
(1,428)         1:A:97:GLY:H         1:A:123:THR:HB         4         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         1         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         1         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         1         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         17         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD11         6         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD13	(1,449)	1:A:17:TYR:HB2	1:A:22:ILE:HA	15	0.02
(1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         1         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         1         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         1         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         17         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD11         6         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD13         6         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD13	(1,449)	1:A:17:TYR:HB3	1:A:22:ILE:HA	15	0.02
(1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         1         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         1         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         17         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD11         6         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD13         6         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD11         8         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD13	(1,428)	1:A:97:GLY:H	1:A:123:THR:HB	4	0.02
(1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         1         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         1         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         17         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD11         6         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD13         6         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD13	(1,415)	1:A:88:ALA:H	1:A:116:VAL:HG21	1	0.02
(1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         17         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD11         6         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD13         6         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD11         8         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD12         8         0.02           (1,413)         1:A:96:THR:HG21         1:A:101:HIS:H	(1,415)	1:A:88:ALA:H	1:A:116:VAL:HG22	1	0.02
(1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         17         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD11         6         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD13         6         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD11         8         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD12         8         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD12         8         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD13         8         0.02           (1,393)         1:A:96:THR:HG21         1:A:101:HIS:H	· · /	1:A:88:ALA:H	1:A:116:VAL:HG23	1	0.02
(1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         17         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD11         6         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD13         6         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD12         8         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD13         8         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD12         8         0.02           (1,413)         1:A:65:THR:HG21         1:A:101:HIS:H         1         0.02           (1,393)         1:A:96:THR:HG21         1:A:101:HIS:H	· /	1:A:88:ALA:H	1:A:116:VAL:HG21	13	0.02
(1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         13         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         17         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD11         6         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD13         6         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD13         8         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD13         8         0.02           (1,413)         1:A:63:THR:H         1:A:101:HIS:H         1         0.02           (1,393)         1:A:96:THR:HG21         1:A:101:HIS:H         1         0.02           (1,393)         1:A:96:THR:HG23         1:A:101:HIS:H         <	· /	1:A:88:ALA:H	1:A:116:VAL:HG22	13	
(1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG21         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         17         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD11         6         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD13         6         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD11         8         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD12         8         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD13         8         0.02           (1,413)         1:A:66:THR:H         1:A:101:HIS:H         1         0.02           (1,393)         1:A:96:THR:HG21         1:A:101:HIS:H         1         0.02           (1,393)         1:A:96:THR:HG23         1:A:101:HIS:H         1         0.02           (1,374)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:140:VAL:H         14         0.02           (1,374)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:140:VAL:H         4<	· /	1:A:88:ALA:H	1:A:116:VAL:HG23	13	0.02
(1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG22         17         0.02           (1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         17         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD11         6         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD12         6         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD13         6         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD11         8         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD12         8         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD13         8         0.02           (1,413)         1:A:66:THR:H         1:A:56:LEU:HD13         8         0.02           (1,413)         1:A:69:THR:H         1:A:101:HIS:H         1         0.02           (1,393)         1:A:96:THR:HG21         1:A:101:HIS:H         1         0.02           (1,393)         1:A:96:THR:HG23         1:A:101:HIS:H         1         0.02           (1,374)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:140:VAL:H         14         0.02           (1,374)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:140:VAL:H         14 <td>( ' /</td> <td>1:A:88:ALA:H</td> <td>1:A:116:VAL:HG21</td> <td>17</td> <td>0.02</td>	( ' /	1:A:88:ALA:H	1:A:116:VAL:HG21	17	0.02
(1,415)         1:A:88:ALA:H         1:A:116:VAL:HG23         17         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD11         6         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD12         6         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD13         6         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD11         8         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD12         8         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD13         8         0.02           (1,413)         1:A:69:THR:HG21         1:A:101:HIS:H         1         0.02           (1,393)         1:A:96:THR:HG21         1:A:101:HIS:H         1         0.02           (1,393)         1:A:96:THR:HG23         1:A:140:VAL:H         14         0.02           (1,374)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:140:VAL:H         14 <td>(1,415)</td> <td>1:A:88:ALA:H</td> <td>1:A:116:VAL:HG22</td> <td>17</td> <td>0.02</td>	(1,415)	1:A:88:ALA:H	1:A:116:VAL:HG22	17	0.02
(1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD11         6         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD12         6         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD13         6         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD11         8         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD12         8         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD13         8         0.02           (1,393)         1:A:66:THR:HG21         1:A:101:HIS:H         1         0.02           (1,393)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:140:VAL:H         14         0.02           (1,374)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:140:VAL:H         14	(1,415)	1:A:88:ALA:H	1:A:116:VAL:HG23	17	0.02
(1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD13         6         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD11         8         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD12         8         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD13         8         0.02           (1,393)         1:A:96:THR:HG21         1:A:101:HIS:H         1         0.02           (1,393)         1:A:96:THR:HG22         1:A:101:HIS:H         1         0.02           (1,393)         1:A:96:THR:HG23         1:A:101:HIS:H         1         0.02           (1,394)         1:A:96:THR:HG23         1:A:101:HIS:H         1         0.02           (1,374)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:140:VAL:H         14         0.02           (1,374)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:140:VAL:H         14         0.02           (1,365)         1:A:14:VAL:HG21         1:A:23:GLU:H         5         0.02           (1,365)         1:A:14:VAL:HG22         1:A:23:GLU:H         5         0.02           (1,365)         1:A:14:VAL:HG23         1:A:23:GLU:H         5         0.02           (1,35)         1:A:115:GLY:H         1:A:116:VAL:H         5	(1,413)	1:A:53:THR:H	1:A:56:LEU:HD11	6	0.02
(1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD11         8         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD12         8         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD13         8         0.02           (1,393)         1:A:96:THR:HG21         1:A:101:HIS:H         1         0.02           (1,393)         1:A:96:THR:HG22         1:A:101:HIS:H         1         0.02           (1,393)         1:A:96:THR:HG23         1:A:101:HIS:H         1         0.02           (1,393)         1:A:96:THR:HG23         1:A:101:HIS:H         1         0.02           (1,374)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:140:VAL:H         14         0.02           (1,374)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:140:VAL:H         14         0.02           (1,374)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:140:VAL:H         14         0.02           (1,365)         1:A:14:VAL:HG21         1:A:23:GLU:H         5         0.02           (1,365)         1:A:14:VAL:HG22         1:A:23:GLU:H         5         0.02           (1,35)         1:A:115:GLY:H         1:A:116:VAL:H         5         0.02	(1,413)	1:A:53:THR:H	1:A:56:LEU:HD12	6	0.02
(1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD12         8         0.02           (1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD13         8         0.02           (1,393)         1:A:96:THR:HG21         1:A:101:HIS:H         1         0.02           (1,393)         1:A:96:THR:HG22         1:A:101:HIS:H         1         0.02           (1,393)         1:A:96:THR:HG23         1:A:101:HIS:H         1         0.02           (1,374)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:140:VAL:H         14         0.02           (1,374)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:140:VAL:H         14         0.02           (1,374)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:140:VAL:H         14         0.02           (1,365)         1:A:14:VAL:HG21         1:A:23:GLU:H         5         0.02           (1,365)         1:A:14:VAL:HG22         1:A:23:GLU:H         5         0.02           (1,365)         1:A:14:VAL:HG23         1:A:23:GLU:H         5         0.02           (1,35)         1:A:115:GLY:H         1:A:116:VAL:H         5         0.02	(1,413)	1:A:53:THR:H	1:A:56:LEU:HD13	6	0.02
(1,413)         1:A:53:THR:H         1:A:56:LEU:HD13         8         0.02           (1,393)         1:A:96:THR:HG21         1:A:101:HIS:H         1         0.02           (1,393)         1:A:96:THR:HG22         1:A:101:HIS:H         1         0.02           (1,393)         1:A:96:THR:HG23         1:A:101:HIS:H         1         0.02           (1,374)         1:A:36:ALA:HB1         1:A:140:VAL:H         14         0.02           (1,374)         1:A:36:ALA:HB2         1:A:140:VAL:H         14         0.02           (1,374)         1:A:36:ALA:HB3         1:A:140:VAL:H         14         0.02           (1,365)         1:A:14:VAL:HG21         1:A:23:GLU:H         5         0.02           (1,365)         1:A:14:VAL:HG22         1:A:23:GLU:H         5         0.02           (1,365)         1:A:14:VAL:HG23         1:A:23:GLU:H         5         0.02           (1,35)         1:A:15:GLY:H         1:A:16:VAL:H         5         0.02	(1,413)	1:A:53:THR:H	1:A:56:LEU:HD11	8	0.02
(1,393)       1:A:96:THR:HG21       1:A:101:HIS:H       1       0.02         (1,393)       1:A:96:THR:HG22       1:A:101:HIS:H       1       0.02         (1,393)       1:A:96:THR:HG23       1:A:101:HIS:H       1       0.02         (1,374)       1:A:36:ALA:HB1       1:A:140:VAL:H       14       0.02         (1,374)       1:A:36:ALA:HB2       1:A:140:VAL:H       14       0.02         (1,374)       1:A:36:ALA:HB3       1:A:140:VAL:H       14       0.02         (1,374)       1:A:36:ALA:HB3       1:A:140:VAL:H       14       0.02         (1,365)       1:A:14:VAL:HG21       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,365)       1:A:14:VAL:HG22       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,365)       1:A:14:VAL:HG23       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,35)       1:A:115:GLY:H       1:A:116:VAL:H       5       0.02	(1,413)	1:A:53:THR:H	1:A:56:LEU:HD12	8	0.02
(1,393)       1:A:96:THR:HG22       1:A:101:HIS:H       1       0.02         (1,393)       1:A:96:THR:HG23       1:A:101:HIS:H       1       0.02         (1,374)       1:A:36:ALA:HB1       1:A:140:VAL:H       14       0.02         (1,374)       1:A:36:ALA:HB2       1:A:140:VAL:H       14       0.02         (1,374)       1:A:36:ALA:HB3       1:A:140:VAL:H       14       0.02         (1,365)       1:A:14:VAL:HG21       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,365)       1:A:14:VAL:HG22       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,365)       1:A:14:VAL:HG23       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,35)       1:A:115:GLY:H       1:A:116:VAL:H       5       0.02	(1,413)	1:A:53:THR:H	1:A:56:LEU:HD13	8	0.02
(1,393)       1:A:96:THR:HG23       1:A:101:HIS:H       1       0.02         (1,374)       1:A:36:ALA:HB1       1:A:140:VAL:H       14       0.02         (1,374)       1:A:36:ALA:HB2       1:A:140:VAL:H       14       0.02         (1,374)       1:A:36:ALA:HB3       1:A:140:VAL:H       14       0.02         (1,374)       1:A:14:VAL:HG21       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,365)       1:A:14:VAL:HG21       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,365)       1:A:14:VAL:HG23       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,365)       1:A:14:VAL:HG23       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,35)       1:A:115:GLY:H       1:A:116:VAL:H       5       0.02	(1,393)	1:A:96:THR:HG21	1:A:101:HIS:H	1	0.02
(1,374)       1:A:36:ALA:HB1       1:A:140:VAL:H       14       0.02         (1,374)       1:A:36:ALA:HB2       1:A:140:VAL:H       14       0.02         (1,374)       1:A:36:ALA:HB3       1:A:140:VAL:H       14       0.02         (1,365)       1:A:14:VAL:HG21       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,365)       1:A:14:VAL:HG22       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,365)       1:A:14:VAL:HG23       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,35)       1:A:115:GLY:H       1:A:116:VAL:H       5       0.02	(1,393)	1:A:96:THR:HG22	1:A:101:HIS:H	1	0.02
(1,374)       1:A:36:ALA:HB2       1:A:140:VAL:H       14       0.02         (1,374)       1:A:36:ALA:HB3       1:A:140:VAL:H       14       0.02         (1,365)       1:A:14:VAL:HG21       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,365)       1:A:14:VAL:HG22       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,365)       1:A:14:VAL:HG23       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,365)       1:A:14:VAL:HG23       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,35)       1:A:115:GLY:H       1:A:116:VAL:H       5       0.02	(1,393)	1:A:96:THR:HG23	1:A:101:HIS:H	1	0.02
(1,374)       1:A:36:ALA:HB2       1:A:140:VAL:H       14       0.02         (1,374)       1:A:36:ALA:HB3       1:A:140:VAL:H       14       0.02         (1,365)       1:A:14:VAL:HG21       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,365)       1:A:14:VAL:HG22       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,365)       1:A:14:VAL:HG23       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,365)       1:A:14:VAL:HG23       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,35)       1:A:115:GLY:H       1:A:116:VAL:H       5       0.02	(1,374)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:140:VAL:H	14	0.02
(1,374)       1:A:36:ALA:HB3       1:A:140:VAL:H       14       0.02         (1,365)       1:A:14:VAL:HG21       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,365)       1:A:14:VAL:HG22       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,365)       1:A:14:VAL:HG23       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,365)       1:A:14:VAL:HG23       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,35)       1:A:115:GLY:H       1:A:116:VAL:H       5       0.02	, ,	1:A:36:ALA:HB2	1:A:140:VAL:H	14	0.02
(1,365)       1:A:14:VAL:HG21       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,365)       1:A:14:VAL:HG22       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,365)       1:A:14:VAL:HG23       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,365)       1:A:115:GLY:H       1:A:116:VAL:H       5       0.02	· · /	1:A:36:ALA:HB3	1:A:140:VAL:H	14	
(1,365)       1:A:14:VAL:HG22       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,365)       1:A:14:VAL:HG23       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,35)       1:A:115:GLY:H       1:A:116:VAL:H       5       0.02	· · /				
(1,365)       1:A:14:VAL:HG23       1:A:23:GLU:H       5       0.02         (1,35)       1:A:115:GLY:H       1:A:116:VAL:H       5       0.02	( , ,				
(1,35) 1:A:115:GLY:H 1:A:116:VAL:H 5 0.02	/	1:A:14:VAL:HG23	1:A:23:GLU:H		
1 (2,0.20)   1:11:00:122:1111   1:11:12:112:1111   0   0:02	(1,340)	1:A:33:ILE:HA	1:A:42:ALA:H	9	0.02
(1,340) 1:A:33:ILE:HA 1:A:42:ALA:H 16 0.02	` ′			16	
(1,317) 1:A:105:PRO:HA 1:A:108:VAL:HG21 5 0.02	· · /				
(1,317) 1:A:105:PRO:HA 1:A:108:VAL:HG22 5 0.02	/				



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,317)	1:A:105:PRO:HA	1:A:108:VAL:HG23	5	0.02
(1,276)	1:A:96:THR:HB	1:A:98:ARG:H	15	0.02
(1,24)	1:A:87:ASN:H	1:A:88:ALA:H	4	0.02
(1,22)	1:A:63:LEU:H	1:A:64:ALA:H	5	0.02
(1,1125)	1:A:144:LEU:O	1:A:33:ILE:H	15	0.02
(1,1125)	1:A:144:LEU:O	1:A:33:ILE:H	16	0.02
(1,1118)	1:A:141:VAL:O	1:A:93:LEU:N	9	0.02
(1,1117)	1:A:139:ARG:O	1:A:91:VAL:H	16	0.02
(1,1116)	1:A:139:ARG:O	1:A:91:VAL:N	6	0.02
(1,1115)	1:A:132:ILE:O	1:A:136:GLU:H	6	0.02
(1,1115)	1:A:132:ILE:O	1:A:136:GLU:H	19	0.02
(1,1109)	1:A:128:ARG:O	1:A:132:ILE:H	11	0.02
(1,1109)	1:A:128:ARG:O	1:A:132:ILE:H	15	0.02
(1,1101)	1:A:124:GLN:O	1:A:128:ARG:H	20	0.02
(1,108)	1:A:49:PRO:HA	1:A:52:ILE:H	17	0.02
(1,1075)	1:A:55:SER:O	1:A:59:GLN:H	15	0.02
(1,1075)	1:A:55:SER:O	1:A:59:GLN:H	16	0.02
(1,105)	1:A:86:ALA:HA	1:A:88:ALA:H	14	0.02
(1,968)	1:A:92:LEU:H	1:A:92:LEU:HD21	9	0.01
(1,968)	1:A:92:LEU:H	1:A:92:LEU:HD22	9	0.01
(1,968)	1:A:92:LEU:H	1:A:92:LEU:HD23	9	0.01
(1,93)	1:A:136:GLU:HA	1:A:137:GLY:H	1	0.01
(1,93)	1:A:136:GLU:HA	1:A:137:GLY:H	3	0.01
(1,93)	1:A:136:GLU:HA	1:A:137:GLY:H	16	0.01
(1,905)	1:A:19:ASP:H	1:A:19:ASP:HB3	7	0.01
(1,875)	1:A:130:TYR:HE1	1:A:141:VAL:HG11	10	0.01
(1,875)	1:A:130:TYR:HE1	1:A:141:VAL:HG12	10	0.01
(1,875)	1:A:130:TYR:HE1	1:A:141:VAL:HG13	10	0.01
(1,875)	1:A:130:TYR:HE2	1:A:141:VAL:HG11	10	0.01
(1,875)	1:A:130:TYR:HE2	1:A:141:VAL:HG12	10	0.01
(1,875)	1:A:130:TYR:HE2	1:A:141:VAL:HG13	10	0.01
(1,859)	1:A:124:GLN:HG2	1:A:128:ARG:HB2	5	0.01
(1,859)	1:A:124:GLN:HG2	1:A:128:ARG:HB3	5	0.01
(1,859)	1:A:124:GLN:HG3	1:A:128:ARG:HB2	5	0.01
(1,859)	1:A:124:GLN:HG3	1:A:128:ARG:HB3	5	0.01
(1,858)	1:A:123:THR:HG21	1:A:144:LEU:HD21	7	0.01
(1,858)	1:A:123:THR:HG21	1:A:144:LEU:HD22	7	0.01
(1,858)	1:A:123:THR:HG21	1:A:144:LEU:HD23	7	0.01
(1,858)	1:A:123:THR:HG22	1:A:144:LEU:HD21	7	0.01
(1,858)	1:A:123:THR:HG22	1:A:144:LEU:HD22	7	0.01
(1,858)	1:A:123:THR:HG22	1:A:144:LEU:HD23	7	0.01
(1,858)	1:A:123:THR:HG23	1:A:144:LEU:HD21	7	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,858)	1:A:123:THR:HG23	1:A:144:LEU:HD22	7	0.01
(1,858)	1:A:123:THR:HG23	1:A:144:LEU:HD23	7	0.01
(1,858)	1:A:123:THR:HG21	1:A:144:LEU:HD21	14	0.01
(1,858)	1:A:123:THR:HG21	1:A:144:LEU:HD22	14	0.01
(1,858)	1:A:123:THR:HG21	1:A:144:LEU:HD23	14	0.01
(1,858)	1:A:123:THR:HG22	1:A:144:LEU:HD21	14	0.01
(1,858)	1:A:123:THR:HG22	1:A:144:LEU:HD22	14	0.01
(1,858)	1:A:123:THR:HG22	1:A:144:LEU:HD23	14	0.01
(1,858)	1:A:123:THR:HG23	1:A:144:LEU:HD21	14	0.01
(1,858)	1:A:123:THR:HG23	1:A:144:LEU:HD22	14	0.01
(1,858)	1:A:123:THR:HG23	1:A:144:LEU:HD23	14	0.01
(1,858)	1:A:123:THR:HG21	1:A:144:LEU:HD21	18	0.01
(1,858)	1:A:123:THR:HG21	1:A:144:LEU:HD22	18	0.01
(1,858)	1:A:123:THR:HG21	1:A:144:LEU:HD23	18	0.01
(1,858)	1:A:123:THR:HG22	1:A:144:LEU:HD21	18	0.01
(1,858)	1:A:123:THR:HG22	1:A:144:LEU:HD22	18	0.01
(1,858)	1:A:123:THR:HG22	1:A:144:LEU:HD23	18	0.01
(1,858)	1:A:123:THR:HG23	1:A:144:LEU:HD21	18	0.01
(1,858)	1:A:123:THR:HG23	1:A:144:LEU:HD22	18	0.01
(1,858)	1:A:123:THR:HG23	1:A:144:LEU:HD23	18	0.01
(1,837)	1:A:111:LEU:HD11	1:A:118:VAL:HG21	7	0.01
(1,837)	1:A:111:LEU:HD11	1:A:118:VAL:HG22	7	0.01
(1,837)	1:A:111:LEU:HD11	1:A:118:VAL:HG23	7	0.01
(1,837)	1:A:111:LEU:HD12	1:A:118:VAL:HG21	7	0.01
(1,837)	1:A:111:LEU:HD12	1:A:118:VAL:HG22	7	0.01
(1,837)	1:A:111:LEU:HD12	1:A:118:VAL:HG23	7	0.01
(1,837)	1:A:111:LEU:HD13	1:A:118:VAL:HG21	7	0.01
(1,837)	1:A:111:LEU:HD13	1:A:118:VAL:HG22	7	0.01
(1,837)	1:A:111:LEU:HD13	1:A:118:VAL:HG23	7	0.01
(1,835)	1:A:111:LEU:HD11	1:A:114:MET:HE1	16	0.01
(1,835)	1:A:111:LEU:HD11	1:A:114:MET:HE2	16	0.01
(1,835)	1:A:111:LEU:HD11	1:A:114:MET:HE3	16	0.01
(1,835)	1:A:111:LEU:HD12	1:A:114:MET:HE1	16	0.01
(1,835)	1:A:111:LEU:HD12	1:A:114:MET:HE2	16	0.01
(1,835)	1:A:111:LEU:HD12	1:A:114:MET:HE3	16	0.01
(1,835)	1:A:111:LEU:HD13	1:A:114:MET:HE1	16	0.01
(1,835)	1:A:111:LEU:HD13	1:A:114:MET:HE2	16	0.01
(1,835)	1:A:111:LEU:HD13	1:A:114:MET:HE3	16	0.01
(1,827)	1:A:105:PRO:HB2	1:A:108:VAL:HG21	4	0.01
(1,827)	1:A:105:PRO:HB2	1:A:108:VAL:HG22	4	0.01
(1,827)	1:A:105:PRO:HB2	1:A:108:VAL:HG23	4	0.01
(1,827)	1:A:105:PRO:HB3	1:A:108:VAL:HG21	4	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,827)	1:A:105:PRO:HB3	1:A:108:VAL:HG22	4	0.01
(1,827)	1:A:105:PRO:HB3	1:A:108:VAL:HG23	4	0.01
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD21	11	0.01
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD22	11	0.01
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD23	11	0.01
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD21	12	0.01
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD22	12	0.01
(1,819)	1:A:101:HIS:HD1	1:A:103:LEU:HD23	12	0.01
(1,817)	1:A:101:HIS:HB2	1:A:103:LEU:HG	2	0.01
(1,817)	1:A:101:HIS:HB3	1:A:103:LEU:HG	2	0.01
(1,816)	1:A:100:GLN:HG2	1:A:120:ALA:HB1	8	0.01
(1,816)	1:A:100:GLN:HG2	1:A:120:ALA:HB2	8	0.01
(1,816)	1:A:100:GLN:HG2	1:A:120:ALA:HB3	8	0.01
(1,816)	1:A:100:GLN:HG3	1:A:120:ALA:HB1	8	0.01
(1,816)	1:A:100:GLN:HG3	1:A:120:ALA:HB2	8	0.01
(1,816)	1:A:100:GLN:HG3	1:A:120:ALA:HB3	8	0.01
(1,812)	1:A:96:THR:HG21	1:A:101:HIS:HB2	6	0.01
(1,812)	1:A:96:THR:HG21	1:A:101:HIS:HB3	6	0.01
(1,812)	1:A:96:THR:HG22	1:A:101:HIS:HB2	6	0.01
(1,812)	1:A:96:THR:HG22	1:A:101:HIS:HB3	6	0.01
(1,812)	1:A:96:THR:HG23	1:A:101:HIS:HB2	6	0.01
(1,812)	1:A:96:THR:HG23	1:A:101:HIS:HB3	6	0.01
(1,778)	1:A:92:LEU:HD11	1:A:116:VAL:HG21	2	0.01
(1,778)	1:A:92:LEU:HD11	1:A:116:VAL:HG22	2	0.01
(1,778)	1:A:92:LEU:HD11	1:A:116:VAL:HG23	2	0.01
(1,778)	1:A:92:LEU:HD12	1:A:116:VAL:HG21	2	0.01
(1,778)	1:A:92:LEU:HD12	1:A:116:VAL:HG22	2	0.01
(1,778)	1:A:92:LEU:HD12	1:A:116:VAL:HG23	2	0.01
(1,778)	1:A:92:LEU:HD13	1:A:116:VAL:HG21	2	0.01
(1,778)	1:A:92:LEU:HD13	1:A:116:VAL:HG22	2	0.01
(1,778)	1:A:92:LEU:HD13	1:A:116:VAL:HG23	2	0.01
(1,770)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:140:VAL:HG21	20	0.01
(1,770)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:140:VAL:HG22	20	0.01
(1,770)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:140:VAL:HG23	20	0.01
(1,770)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:140:VAL:HG21	20	0.01
(1,770)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:140:VAL:HG22	20	0.01
(1,770)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:140:VAL:HG23	20	0.01
(1,770)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:140:VAL:HG21	20	0.01
(1,770)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:140:VAL:HG22	20	0.01
(1,770)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:140:VAL:HG23	20	0.01
(1,768)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:119:GLU:HG2	2	0.01
(1,768)				



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,768)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:119:GLU:HG2	2	0.01
(1,768)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:119:GLU:HG3	2	0.01
(1,768)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:119:GLU:HG2	2	0.01
(1,768)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:119:GLU:HG3	2	0.01
(1,768)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:119:GLU:HG2	7	0.01
(1,768)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:119:GLU:HG3	7	0.01
(1,768)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:119:GLU:HG2	7	0.01
(1,768)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:119:GLU:HG3	7	0.01
(1,768)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:119:GLU:HG2	7	0.01
(1,768)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:119:GLU:HG3	7	0.01
(1,768)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:119:GLU:HG2	8	0.01
(1,768)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:119:GLU:HG3	8	0.01
(1,768)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:119:GLU:HG2	8	0.01
(1,768)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:119:GLU:HG3	8	0.01
(1,768)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:119:GLU:HG2	8	0.01
(1,768)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:119:GLU:HG3	8	0.01
(1,768)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:119:GLU:HG2	12	0.01
(1,768)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:119:GLU:HG3	12	0.01
(1,768)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:119:GLU:HG2	12	0.01
(1,768)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:119:GLU:HG3	12	0.01
(1,768)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:119:GLU:HG2	12	0.01
(1,768)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:119:GLU:HG3	12	0.01
(1,768)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:119:GLU:HG2	14	0.01
(1,768)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:119:GLU:HG3	14	0.01
(1,768)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:119:GLU:HG2	14	0.01
(1,768)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:119:GLU:HG3	14	0.01
(1,768)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:119:GLU:HG2	14	0.01
(1,768)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:119:GLU:HG3	14	0.01
(1,755)	1:A:63:LEU:HD21	1:A:114:MET:HE1	12	0.01
(1,755)	1:A:63:LEU:HD21	1:A:114:MET:HE2	12	0.01
(1,755)	1:A:63:LEU:HD21	1:A:114:MET:HE3	12	0.01
(1,755)	1:A:63:LEU:HD22	1:A:114:MET:HE1	12	0.01
(1,755)	1:A:63:LEU:HD22	1:A:114:MET:HE2	12	0.01
(1,755)	1:A:63:LEU:HD22	1:A:114:MET:HE3	12	0.01
(1,755)	1:A:63:LEU:HD23	1:A:114:MET:HE1	12	0.01
(1,755)	1:A:63:LEU:HD23	1:A:114:MET:HE2	12	0.01
(1,755)	1:A:63:LEU:HD23	1:A:114:MET:HE3	12	0.01
(1,755)	1:A:63:LEU:HD21	1:A:114:MET:HE1	19	0.01
(1,755)	1:A:63:LEU:HD21	1:A:114:MET:HE2	19	0.01
(1,755)	1:A:63:LEU:HD21	1:A:114:MET:HE3	19	0.01
(1,755)	1:A:63:LEU:HD22	1:A:114:MET:HE1	19	0.01
(1,755)	1:A:63:LEU:HD22	1:A:114:MET:HE2	19	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,755)	1:A:63:LEU:HD22	1:A:114:MET:HE3	19	0.01
(1,755)	1:A:63:LEU:HD23	1:A:114:MET:HE1	19	0.01
(1,755)	1:A:63:LEU:HD23	1:A:114:MET:HE2	19	0.01
(1,755)	1:A:63:LEU:HD23	1:A:114:MET:HE3	19	0.01
(1,750)	1:A:63:LEU:HB2	1:A:88:ALA:HB1	6	0.01
(1,750)	1:A:63:LEU:HB2	1:A:88:ALA:HB2	6	0.01
(1,750)	1:A:63:LEU:HB2	1:A:88:ALA:HB3	6	0.01
(1,750)	1:A:63:LEU:HB3	1:A:88:ALA:HB1	6	0.01
(1,750)	1:A:63:LEU:HB3	1:A:88:ALA:HB2	6	0.01
(1,750)	1:A:63:LEU:HB3	1:A:88:ALA:HB3	6	0.01
(1,750)	1:A:63:LEU:HB2	1:A:88:ALA:HB1	13	0.01
(1,750)	1:A:63:LEU:HB2	1:A:88:ALA:HB2	13	0.01
(1,750)	1:A:63:LEU:HB2	1:A:88:ALA:HB3	13	0.01
(1,750)	1:A:63:LEU:HB3	1:A:88:ALA:HB1	13	0.01
(1,750)	1:A:63:LEU:HB3	1:A:88:ALA:HB2	13	0.01
(1,750)	1:A:63:LEU:HB3	1:A:88:ALA:HB3	13	0.01
(1,75)	1:A:87:ASN:HA	1:A:88:ALA:H	10	0.01
(1,746)	1:A:61:ALA:HB1	1:A:89:PRO:HG2	8	0.01
(1,746)	1:A:61:ALA:HB1	1:A:89:PRO:HG3	8	0.01
(1,746)	1:A:61:ALA:HB2	1:A:89:PRO:HG2	8	0.01
(1,746)	1:A:61:ALA:HB2	1:A:89:PRO:HG3	8	0.01
(1,746)	1:A:61:ALA:HB3	1:A:89:PRO:HG2	8	0.01
(1,746)	1:A:61:ALA:HB3	1:A:89:PRO:HG3	8	0.01
(1,739)	1:A:61:ALA:HB1	1:A:114:MET:HE1	13	0.01
(1,739)	1:A:61:ALA:HB1	1:A:114:MET:HE2	13	0.01
(1,739)	1:A:61:ALA:HB1	1:A:114:MET:HE3	13	0.01
(1,739)	1:A:61:ALA:HB2	1:A:114:MET:HE1	13	0.01
(1,739)	1:A:61:ALA:HB2	1:A:114:MET:HE2	13	0.01
(1,739)	1:A:61:ALA:HB2	1:A:114:MET:HE3	13	0.01
(1,739)	1:A:61:ALA:HB3	1:A:114:MET:HE1	13	0.01
(1,739)	1:A:61:ALA:HB3	1:A:114:MET:HE2	13	0.01
(1,739)	1:A:61:ALA:HB3	1:A:114:MET:HE3	13	0.01
(1,728)	1:A:58:GLN:HB2	1:A:111:LEU:HD11	9	0.01
(1,728)	1:A:58:GLN:HB2	1:A:111:LEU:HD12	9	0.01
(1,728)	1:A:58:GLN:HB2	1:A:111:LEU:HD13	9	0.01
(1,728)	1:A:58:GLN:HB3	1:A:111:LEU:HD11	9	0.01
(1,728)	1:A:58:GLN:HB3	1:A:111:LEU:HD12	9	0.01
(1,728)	1:A:58:GLN:HB3	1:A:111:LEU:HD13	9	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB2	1:A:111:LEU:HD11	5	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB2	1:A:111:LEU:HD12	5	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB2	1:A:111:LEU:HD13	5	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB3	1:A:111:LEU:HD11	5	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,722)	1:A:57:LEU:HB3	1:A:111:LEU:HD12	5	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB3	1:A:111:LEU:HD13	5	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB2	1:A:111:LEU:HD11	8	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB2	1:A:111:LEU:HD12	8	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB2	1:A:111:LEU:HD13	8	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB3	1:A:111:LEU:HD11	8	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB3	1:A:111:LEU:HD12	8	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB3	1:A:111:LEU:HD13	8	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB2	1:A:111:LEU:HD11	11	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB2	1:A:111:LEU:HD12	11	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB2	1:A:111:LEU:HD13	11	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB3	1:A:111:LEU:HD11	11	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB3	1:A:111:LEU:HD12	11	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB3	1:A:111:LEU:HD13	11	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB2	1:A:111:LEU:HD11	13	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB2	1:A:111:LEU:HD12	13	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB2	1:A:111:LEU:HD13	13	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB3	1:A:111:LEU:HD11	13	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB3	1:A:111:LEU:HD12	13	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB3	1:A:111:LEU:HD13	13	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB2	1:A:111:LEU:HD11	14	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB2	1:A:111:LEU:HD12	14	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB2	1:A:111:LEU:HD13	14	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB3	1:A:111:LEU:HD11	14	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB3	1:A:111:LEU:HD12	14	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB3	1:A:111:LEU:HD13	14	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB2	1:A:111:LEU:HD11	15	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB2	1:A:111:LEU:HD12	15	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB2	1:A:111:LEU:HD13	15	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB3	1:A:111:LEU:HD11	15	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB3	1:A:111:LEU:HD12	15	0.01
(1,722)	1:A:57:LEU:HB3	1:A:111:LEU:HD13	15	0.01
(1,719)	1:A:54:ALA:HB1	1:A:110:PRO:HG2	11	0.01
(1,719)	1:A:54:ALA:HB1	1:A:110:PRO:HG3	11	0.01
(1,719)	1:A:54:ALA:HB2	1:A:110:PRO:HG2	11	0.01
(1,719)	1:A:54:ALA:HB2	1:A:110:PRO:HG3	11	0.01
(1,719)	1:A:54:ALA:HB3	1:A:110:PRO:HG2	11	0.01
(1,719)	1:A:54:ALA:HB3	1:A:110:PRO:HG3	11	0.01
(1,715)	1:A:53:THR:HG21	1:A:55:SER:HG	5	0.01
(1,715)	1:A:53:THR:HG22	1:A:55:SER:HG	5	0.01
(1,715)	1:A:53:THR:HG23	1:A:55:SER:HG	5	0.01
(1,715)	1:A:53:THR:HG21	1:A:55:SER:HG	15	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,715)	1:A:53:THR:HG22	1:A:55:SER:HG	15	0.01
(1,715)	1:A:53:THR:HG23	1:A:55:SER:HG	15	0.01
(1,715)	1:A:53:THR:HG21	1:A:55:SER:HG	16	0.01
(1,715)	1:A:53:THR:HG22	1:A:55:SER:HG	16	0.01
(1,715)	1:A:53:THR:HG23	1:A:55:SER:HG	16	0.01
(1,713)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:56:LEU:HD21	18	0.01
(1,713)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:56:LEU:HD22	18	0.01
(1,713)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:56:LEU:HD23	18	0.01
(1,713)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:56:LEU:HD21	18	0.01
(1,713)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:56:LEU:HD22	18	0.01
(1,713)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:56:LEU:HD23	18	0.01
(1,713)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:56:LEU:HD21	18	0.01
(1,713)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:56:LEU:HD22	18	0.01
(1,713)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:56:LEU:HD23	18	0.01
(1,704)	1:A:52:ILE:HB	1:A:56:LEU:HD11	11	0.01
(1,704)	1:A:52:ILE:HB	1:A:56:LEU:HD12	11	0.01
(1,704)	1:A:52:ILE:HB	1:A:56:LEU:HD13	11	0.01
(1,704)	1:A:52:ILE:HB	1:A:56:LEU:HD11	15	0.01
(1,704)	1:A:52:ILE:HB	1:A:56:LEU:HD12	15	0.01
(1,704)	1:A:52:ILE:HB	1:A:56:LEU:HD13	15	0.01
(1,704)	1:A:52:ILE:HB	1:A:56:LEU:HD11	17	0.01
(1,704)	1:A:52:ILE:HB	1:A:56:LEU:HD12	17	0.01
(1,704)	1:A:52:ILE:HB	1:A:56:LEU:HD13	17	0.01
(1,702)	1:A:49:PRO:HB2	1:A:98:ARG:HB2	2	0.01
(1,702)	1:A:49:PRO:HB2	1:A:98:ARG:HB3	2	0.01
(1,702)	1:A:49:PRO:HB3	1:A:98:ARG:HB2	2	0.01
(1,702)	1:A:49:PRO:HB3	1:A:98:ARG:HB3	2	0.01
(1,702)	1:A:49:PRO:HB2	1:A:98:ARG:HB2	14	0.01
(1,702)	1:A:49:PRO:HB2	1:A:98:ARG:HB3	14	0.01
(1,702)	1:A:49:PRO:HB3	1:A:98:ARG:HB2	14	0.01
(1,702)	1:A:49:PRO:HB3	1:A:98:ARG:HB3	14	0.01
(1,701)	1:A:49:PRO:HB2	1:A:96:THR:HG21	16	0.01
(1,701)	1:A:49:PRO:HB2	1:A:96:THR:HG22	16	0.01
(1,701)	1:A:49:PRO:HB2	1:A:96:THR:HG23	16	0.01
(1,701)	1:A:49:PRO:HB3	1:A:96:THR:HG21	16	0.01
(1,701)	1:A:49:PRO:HB3	1:A:96:THR:HG22	16	0.01
(1,701)	1:A:49:PRO:HB3	1:A:96:THR:HG23	16	0.01
(1,700)	1:A:49:PRO:HB2	1:A:96:THR:HB	13	0.01
(1,700)	1:A:49:PRO:HB3	1:A:96:THR:HB	13	0.01
(1,695)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:56:LEU:HD11	2	0.01
(1,695)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:56:LEU:HD12	2	0.01
(1,695)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:56:LEU:HD13	2	0.01



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,695)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:56:LEU:HD11	2	0.01
(1,695)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:56:LEU:HD12	2	0.01
(1,695)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:56:LEU:HD13	2	0.01
(1,695)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:56:LEU:HD11	2	0.01
(1,695)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:56:LEU:HD12	2	0.01
(1,695)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:56:LEU:HD13	2	0.01
(1,69)	1:A:38:GLU:HA	1:A:39:GLY:H	18	0.01
(1,686)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:51:ASP:HB2	12	0.01
(1,686)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:51:ASP:HB2	12	0.01
(1,686)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:51:ASP:HB2	12	0.01
(1,686)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:51:ASP:HB2	14	0.01
(1,686)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:51:ASP:HB2	14	0.01
(1,686)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:51:ASP:HB2	14	0.01
(1,685)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:51:ASP:HB3	11	0.01
(1,685)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:51:ASP:HB3	11	0.01
(1,685)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:51:ASP:HB3	11	0.01
(1,676)	1:A:44:TRP:HZ3	1:A:145:LEU:HD21	11	0.01
(1,676)	1:A:44:TRP:HZ3	1:A:145:LEU:HD22	11	0.01
(1,676)	1:A:44:TRP:HZ3	1:A:145:LEU:HD23	11	0.01
(1,673)	1:A:44:TRP:HZ2	1:A:94:VAL:HG21	13	0.01
(1,673)	1:A:44:TRP:HZ2	1:A:94:VAL:HG22	13	0.01
(1,673)	1:A:44:TRP:HZ2	1:A:94:VAL:HG23	13	0.01
(1,673)	1:A:44:TRP:HZ2	1:A:94:VAL:HG21	14	0.01
(1,673)	1:A:44:TRP:HZ2	1:A:94:VAL:HG22	14	0.01
(1,673)	1:A:44:TRP:HZ2	1:A:94:VAL:HG23	14	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG21	6	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG22	6	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG23	6	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG21	6	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG22	6	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG23	6	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG21	6	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG22	6	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG23	6	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG21	8	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG22	8	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG23	8	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG21	8	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG22	8	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG23	8	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG21	8	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG22	8	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG23	8	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG21	9	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG22	9	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG23	9	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG21	9	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG22	9	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG23	9	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG21	9	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG22	9	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG23	9	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG21	10	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG22	10	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG23	10	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG21	10	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG22	10	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG23	10	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG21	10	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG22	10	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG23	10	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG21	12	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG22	12	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG23	12	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG21	12	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG22	12	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG23	12	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG21	12	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG22	12	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG23	12	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG21	15	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG22	15	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG23	15	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG21	15	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG22	15	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG23	15	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG21	15	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG22	15	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG23	15	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG21	16	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG22	16	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG23	16	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG21	16	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG22	16	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG23	16	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG21	16	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG22	16	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG23	16	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG21	20	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG22	20	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB1	1:A:141:VAL:HG23	20	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG21	20	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG22	20	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB2	1:A:141:VAL:HG23	20	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG21	20	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG22	20	0.01
(1,648)	1:A:36:ALA:HB3	1:A:141:VAL:HG23	20	0.01
(1,639)	1:A:34:ALA:HB1	1:A:42:ALA:HB1	1	0.01
(1,639)	1:A:34:ALA:HB1	1:A:42:ALA:HB2	1	0.01
(1,639)	1:A:34:ALA:HB1	1:A:42:ALA:HB3	1	0.01
(1,639)	1:A:34:ALA:HB2	1:A:42:ALA:HB1	1	0.01
(1,639)	1:A:34:ALA:HB2	1:A:42:ALA:HB2	1	0.01
(1,639)	1:A:34:ALA:HB2	1:A:42:ALA:HB3	1	0.01
(1,639)	1:A:34:ALA:HB3	1:A:42:ALA:HB1	1	0.01
(1,639)	1:A:34:ALA:HB3	1:A:42:ALA:HB2	1	0.01
(1,639)	1:A:34:ALA:HB3	1:A:42:ALA:HB3	1	0.01
(1,625)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:44:TRP:HB3	13	0.01
(1,625)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:44:TRP:HB3	13	0.01
(1,625)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:44:TRP:HB3	13	0.01
(1,620)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:145:LEU:HD21	17	0.01
(1,620)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:145:LEU:HD22	17	0.01
(1,620)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:145:LEU:HD23	17	0.01
(1,620)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:145:LEU:HD21	17	0.01
(1,620)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:145:LEU:HD22	17	0.01
(1,620)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:145:LEU:HD23	17	0.01
(1,620)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:145:LEU:HD21	17	0.01
(1,620)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:145:LEU:HD22	17	0.01
(1,620)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:145:LEU:HD23	17	0.01
(1,617)	1:A:31:HIS:HE1	1:A:33:ILE:HG21	3	0.01
(1,617)	1:A:31:HIS:HE1	1:A:33:ILE:HG22	3	0.01
(1,617)	1:A:31:HIS:HE1	1:A:33:ILE:HG23	3	0.01
(1,617)	1:A:31:HIS:HE1	1:A:33:ILE:HG21	15	0.01
(1,617)	1:A:31:HIS:HE1	1:A:33:ILE:HG22	15	0.01
(1,617)	1:A:31:HIS:HE1	1:A:33:ILE:HG23	15	0.01
(1,614)	1:A:29:PHE:HE1	1:A:41:VAL:HB	2	0.01
(1,614)	1:A:29:PHE:HE2	1:A:41:VAL:HB	2	0.01
\	<del>-</del>			ad on mort mage



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,614)	1:A:29:PHE:HE1	1:A:41:VAL:HB	7	0.01
(1,614)	1:A:29:PHE:HE2	1:A:41:VAL:HB	7	0.01
(1,597)	1:A:24:VAL:HB	1:A:29:PHE:HE1	4	0.01
(1,597)	1:A:24:VAL:HB	1:A:29:PHE:HE2	4	0.01
(1,597)	1:A:24:VAL:HB	1:A:29:PHE:HE1	6	0.01
(1,597)	1:A:24:VAL:HB	1:A:29:PHE:HE2	6	0.01
(1,597)	1:A:24:VAL:HB	1:A:29:PHE:HE1	14	0.01
(1,597)	1:A:24:VAL:HB	1:A:29:PHE:HE2	14	0.01
(1,597)	1:A:24:VAL:HB	1:A:29:PHE:HE1	18	0.01
(1,597)	1:A:24:VAL:HB	1:A:29:PHE:HE2	18	0.01
(1,578)	1:A:17:TYR:HE1	1:A:22:ILE:HD11	2	0.01
(1,578)	1:A:17:TYR:HE1	1:A:22:ILE:HD12	2	0.01
(1,578)	1:A:17:TYR:HE1	1:A:22:ILE:HD13	2	0.01
(1,578)	1:A:17:TYR:HE2	1:A:22:ILE:HD11	2	0.01
(1,578)	1:A:17:TYR:HE2	1:A:22:ILE:HD12	2	0.01
(1,578)	1:A:17:TYR:HE2	1:A:22:ILE:HD13	2	0.01
(1,575)	1:A:16:ALA:HB1	1:A:23:GLU:HB2	10	0.01
(1,575)	1:A:16:ALA:HB1	1:A:23:GLU:HB3	10	0.01
(1,575)	1:A:16:ALA:HB2	1:A:23:GLU:HB2	10	0.01
(1,575)	1:A:16:ALA:HB2	1:A:23:GLU:HB3	10	0.01
(1,575)	1:A:16:ALA:HB3	1:A:23:GLU:HB2	10	0.01
(1,575)	1:A:16:ALA:HB3	1:A:23:GLU:HB3	10	0.01
(1,575)	1:A:16:ALA:HB1	1:A:23:GLU:HB2	17	0.01
(1,575)	1:A:16:ALA:HB1	1:A:23:GLU:HB3	17	0.01
(1,575)	1:A:16:ALA:HB2	1:A:23:GLU:HB2	17	0.01
(1,575)	1:A:16:ALA:HB2	1:A:23:GLU:HB3	17	0.01
(1,575)	1:A:16:ALA:HB3	1:A:23:GLU:HB2	17	0.01
(1,575)	1:A:16:ALA:HB3	1:A:23:GLU:HB3	17	0.01
(1,575)	1:A:16:ALA:HB1	1:A:23:GLU:HB2	19	0.01
(1,575)	1:A:16:ALA:HB1	1:A:23:GLU:HB3	19	0.01
(1,575)	1:A:16:ALA:HB2	1:A:23:GLU:HB2	19	0.01
(1,575)	1:A:16:ALA:HB2	1:A:23:GLU:HB3	19	0.01
(1,575)	1:A:16:ALA:HB3	1:A:23:GLU:HB2	19	0.01
(1,575)	1:A:16:ALA:HB3	1:A:23:GLU:HB3	19	0.01
(1,574)	1:A:16:ALA:HB1	1:A:21:TYR:HE1	2	0.01
(1,574)	1:A:16:ALA:HB1	1:A:21:TYR:HE2	2	0.01
(1,574)	1:A:16:ALA:HB2	1:A:21:TYR:HE1	2	0.01
(1,574)	1:A:16:ALA:HB2	1:A:21:TYR:HE2	2	0.01
(1,574)	1:A:16:ALA:HB3	1:A:21:TYR:HE1	2	0.01
(1,574)	1:A:16:ALA:HB3	1:A:21:TYR:HE2	2	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG11	1:A:24:VAL:HG21	12	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG11	1:A:24:VAL:HG22	12	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,571)	1:A:14:VAL:HG11	1:A:24:VAL:HG23	12	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG12	1:A:24:VAL:HG21	12	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG12	1:A:24:VAL:HG22	12	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG12	1:A:24:VAL:HG23	12	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG13	1:A:24:VAL:HG21	12	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG13	1:A:24:VAL:HG22	12	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG13	1:A:24:VAL:HG23	12	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG21	1:A:24:VAL:HG21	12	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG21	1:A:24:VAL:HG22	12	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG21	1:A:24:VAL:HG23	12	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG22	1:A:24:VAL:HG21	12	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG22	1:A:24:VAL:HG22	12	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG22	1:A:24:VAL:HG23	12	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG23	1:A:24:VAL:HG21	12	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG23	1:A:24:VAL:HG22	12	0.01
(1,571)	1:A:14:VAL:HG23	1:A:24:VAL:HG23	12	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG11	1:A:22:ILE:HG21	18	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG11	1:A:22:ILE:HG22	18	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG11	1:A:22:ILE:HG23	18	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG12	1:A:22:ILE:HG21	18	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG12	1:A:22:ILE:HG22	18	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG12	1:A:22:ILE:HG23	18	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG13	1:A:22:ILE:HG21	18	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG13	1:A:22:ILE:HG22	18	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG13	1:A:22:ILE:HG23	18	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG21	1:A:22:ILE:HG21	18	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG21	1:A:22:ILE:HG22	18	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG21	1:A:22:ILE:HG23	18	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG22	1:A:22:ILE:HG21	18	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG22	1:A:22:ILE:HG22	18	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG22	1:A:22:ILE:HG23	18	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG23	1:A:22:ILE:HG21	18	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG23	1:A:22:ILE:HG22	18	0.01
(1,570)	1:A:14:VAL:HG23	1:A:22:ILE:HG23	18	0.01
(1,560)	1:A:13:THR:HG21	1:A:15:THR:HG21	8	0.01
(1,560)	1:A:13:THR:HG21	1:A:15:THR:HG22	8	0.01
(1,560)	1:A:13:THR:HG21	1:A:15:THR:HG23	8	0.01
(1,560)	1:A:13:THR:HG22	1:A:15:THR:HG21	8	0.01
(1,560)	1:A:13:THR:HG22	1:A:15:THR:HG22	8	0.01
(1,560)	1:A:13:THR:HG22	1:A:15:THR:HG23	8	0.01
(1,560)	1:A:13:THR:HG23	1:A:15:THR:HG21	8	0.01
(1,560)	1:A:13:THR:HG23	1:A:15:THR:HG22	8	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,560)	1:A:13:THR:HG23	1:A:15:THR:HG23	8	0.01
(1,555)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:134:MET:HG2	15	0.01
(1,555)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:134:MET:HG3	15	0.01
(1,555)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:134:MET:HG2	15	0.01
(1,555)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:134:MET:HG3	15	0.01
(1,555)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:134:MET:HG2	15	0.01
(1,555)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:134:MET:HG3	15	0.01
(1,553)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:134:MET:HE1	8	0.01
(1,553)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:134:MET:HE2	8	0.01
(1,553)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:134:MET:HE3	8	0.01
(1,553)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:134:MET:HE1	8	0.01
(1,553)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:134:MET:HE2	8	0.01
(1,553)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:134:MET:HE3	8	0.01
(1,553)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:134:MET:HE1	8	0.01
(1,553)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:134:MET:HE2	8	0.01
(1,553)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:134:MET:HE3	8	0.01
(1,553)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:134:MET:HE1	12	0.01
(1,553)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:134:MET:HE2	12	0.01
(1,553)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:134:MET:HE3	12	0.01
(1,553)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:134:MET:HE1	12	0.01
(1,553)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:134:MET:HE2	12	0.01
(1,553)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:134:MET:HE3	12	0.01
(1,553)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:134:MET:HE1	12	0.01
(1,553)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:134:MET:HE2	12	0.01
(1,553)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:134:MET:HE3	12	0.01
(1,552)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:134:MET:HE1	9	0.01
(1,552)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:134:MET:HE2	9	0.01
(1,552)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:134:MET:HE3	9	0.01
(1,552)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:134:MET:HE1	17	0.01
(1,552)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:134:MET:HE2	17	0.01
(1,552)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:134:MET:HE3	17	0.01
(1,547)	1:A:132:ILE:HG21	1:A:136:GLU:HA	11	0.01
(1,547)	1:A:132:ILE:HG22	1:A:136:GLU:HA	11	0.01
(1,547)	1:A:132:ILE:HG23	1:A:136:GLU:HA	11	0.01
(1,547)	1:A:132:ILE:HG21	1:A:136:GLU:HA	13	0.01
(1,547)	1:A:132:ILE:HG22	1:A:136:GLU:HA	13	0.01
(1,547)	1:A:132:ILE:HG23	1:A:136:GLU:HA	13	0.01
(1,535)	1:A:119:GLU:HA	1:A:121:MET:HE1	18	0.01
(1,535)	1:A:119:GLU:HA	1:A:121:MET:HE2	18	0.01
(1,535)	1:A:119:GLU:HA	1:A:121:MET:HE3	18	0.01
(1,526)	1:A:96:THR:HA	1:A:145:LEU:HD11	2	0.01
(1,526)	1:A:96:THR:HA	1:A:145:LEU:HD12	2	0.01



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

(1,526) 1:A:96:THR:HA 1:A:145:LEU:HD13 2 0.01 (1,526) 1:A:96:THR:HA 1:A:145:LEU:HD11 13 0.01 (1,526) 1:A:96:THR:HA 1:A:145:LEU:HD12 13 0.01 (1,526) 1:A:96:THR:HA 1:A:145:LEU:HD13 13 0.01 (1,526) 1:A:96:THR:HA 1:A:145:LEU:HD13 13 0.01 (1,525) 1:A:95:GLY:HA2 1:A:144:LEU:HD21 7 0.01 (1,525) 1:A:95:GLY:HA2 1:A:144:LEU:HD22 7 0.01 (1,525) 1:A:95:GLY:HA2 1:A:144:LEU:HD22 7 0.01 (1,525) 1:A:95:GLY:HA3 1:A:144:LEU:HD23 7 0.01 (1,525) 1:A:95:GLY:HA3 1:A:144:LEU:HD22 15 0.01 (1,525) 1:A:95:GLY:HA2 1:A:144:LEU:HD23 15 0.01 (1,525) 1:A:95:GLY:HA2 1:A:144:LEU:HD22 15 0.01 (1,525) 1:A:95:GLY:HA3 1:A:144:LEU:HD23 15 0.01 (1,525) 1:A:95:GLY:HA3 1:A:139:ARG:HG2 7 0.01 (1,499) 1:A:89:PRO:HA 1:A:139:ARG:HG3 7 0.01 (1,499) 1:A:89:PRO:HA 1:A:139:ARG:HG3 7 0.01 (1,498) 1:A:89:PRO:HA 1:A:139:ARG:HG3 7 0.01 (1,498) 1:A:89:PRO:HA 1:A:139:ARG:HB3 12 0.01 (1,498) 1:A:89:PRO:HA 1:A:139:ARG:HB3 12 0.01 (1,498) 1:A:59:GLN:HA 1:A:164:ALA:HB1 7 0.01 (1,492) 1:A:59:GLN:HA 1:A:164:ALA:HB3 7 0.01 (1,492) 1:A:59:GLN:HA 1:A:164:ALA:HB3 7 0.01 (1,492) 1:A:59:GLN:HA 1:A:164:ALA:HB3 7 0.01 (1,487) 1:A:54:ALA:HB3 1:A:107:GLN:HA 17 0.01 (1,487) 1:A:54:ALA:HB3 1:A:107:GLN:HA 17 0.01 (1,487) 1:A:54:ALA:HB3 1:A:107:GLN:HA 17 0.01 (1,487) 1:A:54:ALA:HB3 1:A:107:GLN:HA 19 0.01 (1,489) 1:A:48:ARG:HA 1:A:145:LEU:HD22 4 0.01 (1,479) 1:A:48:ARG:HA 1:A:145:LEU:HD23 5 0.01 (1,479) 1:A:48:ARG:HA 1:A:145:LEU:HD23 5 0.	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,526)         1:A:96:THR:HA         1:A:145:LEU:HD12         13         0.01           (1,526)         1:A:96:GHR:HA         1:A:145:LEU:HD13         13         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD21         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD23         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD21         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD22         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD22         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD21         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD22         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD22         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3 <t< td=""><td>(1,526)</td><td>1:A:96:THR:HA</td><td>1:A:145:LEU:HD13</td><td>2</td><td>0.01</td></t<>	(1,526)	1:A:96:THR:HA	1:A:145:LEU:HD13	2	0.01
(1,526)         1:A:96:THR:HA         1:A:145:LEU:HD13         13         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD21         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD22         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD21         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD21         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD21         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD21         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         <	(1,526)	1:A:96:THR:HA	1:A:145:LEU:HD11	13	0.01
(1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD21         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD22         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD23         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD21         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD22         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD21         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3	(1,526)	1:A:96:THR:HA	1:A:145:LEU:HD12	13	0.01
(1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD22         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD23         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD21         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD21         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD22         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,429)         1:A:95:GLY:HA3	(1,526)	1:A:96:THR:HA	1:A:145:LEU:HD13	13	0.01
(1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD23         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD21         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD22         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD21         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD22         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD21         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,499)         1:A:39:ACHA         1:A:139:ACHA         2         0.01           (1,499)         1:A:89:PRO:HA         1:A	(1,525)	1:A:95:GLY:HA2	1:A:144:LEU:HD21	7	0.01
(1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD21         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD22         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD21         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD21         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,420)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:143:LEU:HD23         15         0.01           (1,449)         1:A:89:PRO:HA	(1,525)	1:A:95:GLY:HA2	1:A:144:LEU:HD22	7	0.01
(1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD22         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD21         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD22         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD21         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD22         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD22         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD22         15         0.01           (1,525)         1:A:143:EASN:H         2         0.01           (1,492)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HG2         7         0.01           (1,499)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HB3 <t< td=""><td>(1,525)</td><td>1:A:95:GLY:HA2</td><td>1:A:144:LEU:HD23</td><td>7</td><td>0.01</td></t<>	(1,525)	1:A:95:GLY:HA2	1:A:144:LEU:HD23	7	0.01
(1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         7         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD21         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD22         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD21         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD22         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,526)         1:A:149:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,429)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HG2         7         0.01           (1,499)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HB3         12         0.01           (1,498)         1:A:59:GLN:HA	(1,525)	1:A:95:GLY:HA3	1:A:144:LEU:HD21	7	0.01
(1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD21         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD22         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD21         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD22         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,526)         1:A:195:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,499)         1:A:39:GLY:HA3         1:A:142:ASN:H         2         0.01           (1,499)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HB3         7         0.01           (1,498)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HB3         12         0.01           (1,498)         1:A:59:GLN:HA <td< td=""><td>(1,525)</td><td>1:A:95:GLY:HA3</td><td>1:A:144:LEU:HD22</td><td>7</td><td>0.01</td></td<>	(1,525)	1:A:95:GLY:HA3	1:A:144:LEU:HD22	7	0.01
(1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD22         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD21         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD22         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:143:LEU:HD23         15         0.01           (1,499)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HG2         7         0.01           (1,499)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HB2         12         0.01           (1,498)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HB3         12         0.01           (1,498)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HB3         12         0.01           (1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB1         7         0.01           (1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:	(1,525)	1:A:95:GLY:HA3	1:A:144:LEU:HD23	7	0.01
(1,525)         1:A:95:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD21         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD22         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,525)         1:A:11:LEU:HA         1:A:12:ASN:H         2         0.01           (1,499)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HG2         7         0.01           (1,499)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HB3         7         0.01           (1,498)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HB3         12         0.01           (1,498)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HB3         12         0.01           (1,498)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HB3         12         0.01           (1,498)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB1         7         0.01           (1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB2         7         0.01           (1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB3         7         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB1         1:A:107:GLN:HA	(1,525)	1:A:95:GLY:HA2	1:A:144:LEU:HD21	15	0.01
(1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD21         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD22         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,52)         1:A:11:LEU:HA         1:A:12:ASN:H         2         0.01           (1,499)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HG2         7         0.01           (1,499)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HB3         7         0.01           (1,498)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HB2         12         0.01           (1,498)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HB3         12         0.01           (1,498)         1:A:89:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB3         12         0.01           (1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB2         7         0.01           (1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB3         7         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB1         1:A:107:GLN:HA         17         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA	(1,525)	1:A:95:GLY:HA2	1:A:144:LEU:HD22	15	0.01
(1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD22         15         0.01           (1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,52)         1:A:11:LEU:HA         1:A:12:ASN:H         2         0.01           (1,499)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HG2         7         0.01           (1,499)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HB3         7         0.01           (1,498)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HB3         12         0.01           (1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB1         7         0.01           (1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB2         7         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB1         1:A:107:GLN:HA         17         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA	(1,525)	1:A:95:GLY:HA2	1:A:144:LEU:HD23	15	0.01
(1,525)         1:A:95:GLY:HA3         1:A:144:LEU:HD23         15         0.01           (1,52)         1:A:11:LEU:HA         1:A:12:ASN:H         2         0.01           (1,499)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HG2         7         0.01           (1,499)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HG3         7         0.01           (1,498)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HB2         12         0.01           (1,498)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HB3         12         0.01           (1,490)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB1         7         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB1         1:A:107:GLN:HA         17         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA	(1,525)	1:A:95:GLY:HA3	1:A:144:LEU:HD21	15	0.01
(1,52)         1:A:11:LEU:HA         1:A:12:ASN:H         2         0.01           (1,499)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HG2         7         0.01           (1,499)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HG3         7         0.01           (1,498)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HB2         12         0.01           (1,498)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HB3         12         0.01           (1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB1         7         0.01           (1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB2         7         0.01           (1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB3         7         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB1         1:A:107:GLN:HA         17         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB2         1:A:107:GLN:HA         17         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,482)         1:A:52:ILE:HA         1:A:56:LEU:HD11         <	(1,525)	1:A:95:GLY:HA3	1:A:144:LEU:HD22	15	0.01
(1,499)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HG2         7         0.01           (1,499)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HG3         7         0.01           (1,498)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HB2         12         0.01           (1,498)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HB3         12         0.01           (1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB1         7         0.01           (1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB2         7         0.01           (1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB3         7         0.01           (1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB3         7         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB1         1:A:107:GLN:HA         17         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB2         1:A:107:GLN:HA         17         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB2         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,482)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA	(1,525)	1:A:95:GLY:HA3	1:A:144:LEU:HD23	15	0.01
(1,499)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HG3         7         0.01           (1,498)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HB2         12         0.01           (1,498)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HB3         12         0.01           (1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB1         7         0.01           (1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB2         7         0.01           (1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB3         7         0.01           (1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:107:GLN:HA         17         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB1         1:A:107:GLN:HA         17         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB2         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,482)         1:A:52:ILE:HA         1:A:56:LEU:HD11         5         0.01           (1,482)         1:A:52:ILE:HA         1:A:56:LEU:HD13	(1,52)	1:A:11:LEU:HA	1:A:12:ASN:H	2	0.01
(1,498)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HB2         12         0.01           (1,498)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HB3         12         0.01           (1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB1         7         0.01           (1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB2         7         0.01           (1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB3         7         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB1         1:A:107:GLN:HA         17         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB2         1:A:107:GLN:HA         17         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,482)         1:A:52:ILE:HA         1:A:56:LEU:HD11         5         0.01           (1,482)         1:A:52:ILE:HA         1:A:56:LEU:HD12	(1,499)	1:A:89:PRO:HA	1:A:139:ARG:HG2	7	0.01
(1,498)         1:A:89:PRO:HA         1:A:139:ARG:HB3         12         0.01           (1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB1         7         0.01           (1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB2         7         0.01           (1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB3         7         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB1         1:A:107:GLN:HA         17         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB2         1:A:107:GLN:HA         17         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB1         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB2         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,482)         1:A:52:ILE:HA         1:A:56:LEU:HD11         5         0.01           (1,482)         1:A:52:ILE:HA         1:A:56:LEU:HD12         5         0.01           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21         4         0.01           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD23	(1,499)	1:A:89:PRO:HA	1:A:139:ARG:HG3	7	0.01
(1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB1         7         0.01           (1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB2         7         0.01           (1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB3         7         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB1         1:A:107:GLN:HA         17         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB2         1:A:107:GLN:HA         17         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB2         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,482)         1:A:52:ILE:HA         1:A:56:LEU:HD11         5         0.01           (1,482)         1:A:52:ILE:HA         1:A:56:LEU:HD12         5         0.01           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21         4         0.01           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21	(1,498)	1:A:89:PRO:HA	1:A:139:ARG:HB2	12	0.01
(1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB2         7         0.01           (1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB3         7         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB1         1:A:107:GLN:HA         17         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB2         1:A:107:GLN:HA         17         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB1         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB2         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:52:ILE:HA         1:A:56:LEU:HD11         5         0.01           (1,482)         1:A:52:ILE:HA         1:A:56:LEU:HD12         5         0.01           (1,482)         1:A:52:ILE:HA         1:A:56:LEU:HD13         5         0.01           (1,482)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21         4         0.01           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD23         4         0.01           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21	(1,498)	1:A:89:PRO:HA	1:A:139:ARG:HB3	12	0.01
(1,492)         1:A:59:GLN:HA         1:A:64:ALA:HB3         7         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB1         1:A:107:GLN:HA         17         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB2         1:A:107:GLN:HA         17         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB1         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB2         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,482)         1:A:52:ILE:HA         1:A:56:LEU:HD11         5         0.01           (1,482)         1:A:52:ILE:HA         1:A:56:LEU:HD12         5         0.01           (1,482)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21         4         0.01           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD22         4         0.01           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21	(1,492)	1:A:59:GLN:HA	1:A:64:ALA:HB1	7	0.01
(1,487)         1:A:54:ALA:HB1         1:A:107:GLN:HA         17         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB2         1:A:107:GLN:HA         17         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA         17         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB1         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB2         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,482)         1:A:52:ILE:HA         1:A:56:LEU:HD11         5         0.01           (1,482)         1:A:52:ILE:HA         1:A:56:LEU:HD12         5         0.01           (1,482)         1:A:52:ILE:HA         1:A:56:LEU:HD13         5         0.01           (1,482)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21         4         0.01           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD22         4         0.01           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21         5         0.01           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD22         5         0.01           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD22 <td>(1,492)</td> <td>1:A:59:GLN:HA</td> <td>1:A:64:ALA:HB2</td> <td>7</td> <td>0.01</td>	(1,492)	1:A:59:GLN:HA	1:A:64:ALA:HB2	7	0.01
(1,487)         1:A:54:ALA:HB2         1:A:107:GLN:HA         17         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA         17         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB1         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB2         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:52:ILE:HA         1:A:56:LEU:HD11         5         0.01           (1,482)         1:A:52:ILE:HA         1:A:56:LEU:HD12         5         0.01           (1,482)         1:A:52:ILE:HA         1:A:56:LEU:HD13         5         0.01           (1,482)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21         4         0.01           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD22         4         0.01           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21         5         0.01           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD22         5         0.01           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD22         5         0.01	(1,492)	1:A:59:GLN:HA	1:A:64:ALA:HB3	7	0.01
(1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA         17         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB1         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB2         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:52:ILE:HA         1:A:56:LEU:HD11         5         0.01           (1,482)         1:A:52:ILE:HA         1:A:56:LEU:HD12         5         0.01           (1,482)         1:A:52:ILE:HA         1:A:56:LEU:HD13         5         0.01           (1,482)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21         4         0.01           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD22         4         0.01           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21         5         0.01           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21         5         0.01           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD22         5         0.01           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD22         5         0.01	(1,487)	1:A:54:ALA:HB1	1:A:107:GLN:HA	17	0.01
(1,487)         1:A:54:ALA:HB1         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB2         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,487)         1:A:54:ALA:HB3         1:A:107:GLN:HA         19         0.01           (1,482)         1:A:52:ILE:HA         1:A:56:LEU:HD11         5         0.01           (1,482)         1:A:52:ILE:HA         1:A:56:LEU:HD12         5         0.01           (1,482)         1:A:52:ILE:HA         1:A:56:LEU:HD13         5         0.01           (1,482)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21         4         0.01           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD22         4         0.01           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21         5         0.01           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD21         5         0.01           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD22         5         0.01           (1,479)         1:A:48:ARG:HA         1:A:145:LEU:HD22         5         0.01	(1,487)	1:A:54:ALA:HB2	1:A:107:GLN:HA	17	0.01
(1,487)       1:A:54:ALA:HB2       1:A:107:GLN:HA       19       0.01         (1,487)       1:A:54:ALA:HB3       1:A:107:GLN:HA       19       0.01         (1,487)       1:A:52:ILE:HA       1:A:56:LEU:HD11       5       0.01         (1,482)       1:A:52:ILE:HA       1:A:56:LEU:HD12       5       0.01         (1,482)       1:A:52:ILE:HA       1:A:56:LEU:HD13       5       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD21       4       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD22       4       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD23       4       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD21       5       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD21       5       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD22       5       0.01	(1,487)	1:A:54:ALA:HB3	1:A:107:GLN:HA	17	0.01
(1,487)       1:A:54:ALA:HB3       1:A:107:GLN:HA       19       0.01         (1,482)       1:A:52:ILE:HA       1:A:56:LEU:HD11       5       0.01         (1,482)       1:A:52:ILE:HA       1:A:56:LEU:HD12       5       0.01         (1,482)       1:A:52:ILE:HA       1:A:56:LEU:HD13       5       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD21       4       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD22       4       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD23       4       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD21       5       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD22       5       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD22       5       0.01	(1,487)	1:A:54:ALA:HB1	1:A:107:GLN:HA	19	0.01
(1,482)       1:A:52:ILE:HA       1:A:56:LEU:HD11       5       0.01         (1,482)       1:A:52:ILE:HA       1:A:56:LEU:HD12       5       0.01         (1,482)       1:A:52:ILE:HA       1:A:56:LEU:HD13       5       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD21       4       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD22       4       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD23       4       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD21       5       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD22       5       0.01	(1,487)	1:A:54:ALA:HB2	1:A:107:GLN:HA	19	0.01
(1,482)       1:A:52:ILE:HA       1:A:56:LEU:HD12       5       0.01         (1,482)       1:A:52:ILE:HA       1:A:56:LEU:HD13       5       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD21       4       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD22       4       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD23       4       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD21       5       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD22       5       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD22       5       0.01	(1,487)	1:A:54:ALA:HB3	1:A:107:GLN:HA	19	0.01
(1,482)       1:A:52:ILE:HA       1:A:56:LEU:HD13       5       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD21       4       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD22       4       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD23       4       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD21       5       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD22       5       0.01	(1,482)	1:A:52:ILE:HA	1:A:56:LEU:HD11	5	0.01
(1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD21       4       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD22       4       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD23       4       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD21       5       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD22       5       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD22       5       0.01	(1,482)	1:A:52:ILE:HA	1:A:56:LEU:HD12	5	0.01
(1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD22       4       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD23       4       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD21       5       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD22       5       0.01		1:A:52:ILE:HA	1:A:56:LEU:HD13	5	0.01
(1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD22       4       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD23       4       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD21       5       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD22       5       0.01	_ `	1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD21	4	0.01
(1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD23       4       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD21       5       0.01         (1,479)       1:A:48:ARG:HA       1:A:145:LEU:HD22       5       0.01		1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD22	4	0.01
(1,479) 1:A:48:ARG:HA 1:A:145:LEU:HD22 5 0.01		1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD23	4	0.01
	_ `	1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD21	5	0.01
(1,479) 1:A:48:ARG:HA 1:A:145:LEU:HD23 5 0.01	(1,479)	1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD22	5	0.01
	(1,479)	1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD23	5	0.01
(1,479) 1:A:48:ARG:HA 1:A:145:LEU:HD21 13 0.01		1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD21	13	0.01
(1,479) 1:A:48:ARG:HA 1:A:145:LEU:HD22 13 0.01	(1,479)	1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD22	13	0.01
(1,479) 1:A:48:ARG:HA 1:A:145:LEU:HD23 13 0.01	(1,479)	1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD23	13	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,479)	1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD21	14	0.01
(1,479)	1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD22	14	0.01
(1,479)	1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD23	14	0.01
(1,478)	1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD11	17	0.01
(1,478)	1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD12	17	0.01
(1,478)	1:A:48:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD13	17	0.01
(1,477)	1:A:47:GLN:HA	1:A:146:PRO:HD2	11	0.01
(1,477)	1:A:47:GLN:HA	1:A:146:PRO:HD3	11	0.01
(1,477)	1:A:47:GLN:HA	1:A:146:PRO:HD2	18	0.01
(1,477)	1:A:47:GLN:HA	1:A:146:PRO:HD3	18	0.01
(1,467)	1:A:35:PHE:HB2	1:A:41:VAL:HA	4	0.01
(1,467)	1:A:35:PHE:HB3	1:A:41:VAL:HA	4	0.01
(1,467)	1:A:35:PHE:HB2	1:A:41:VAL:HA	5	0.01
(1,467)	1:A:35:PHE:HB3	1:A:41:VAL:HA	5	0.01
(1,450)	1:A:17:TYR:HD1	1:A:124:GLN:HA	12	0.01
(1,450)	1:A:17:TYR:HD2	1:A:124:GLN:HA	12	0.01
(1,444)	1:A:14:VAL:HA	1:A:24:VAL:HG21	8	0.01
(1,444)	1:A:14:VAL:HA	1:A:24:VAL:HG22	8	0.01
(1,444)	1:A:14:VAL:HA	1:A:24:VAL:HG23	8	0.01
(1,438)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:37:PRO:HA	9	0.01
(1,438)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:37:PRO:HA	9	0.01
(1,438)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:37:PRO:HA	9	0.01
(1,438)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:37:PRO:HA	17	0.01
(1,438)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:37:PRO:HA	17	0.01
(1,438)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:37:PRO:HA	17	0.01
(1,434)	1:A:129:THR:H	1:A:132:ILE:HD11	20	0.01
(1,434)	1:A:129:THR:H	1:A:132:ILE:HD12	20	0.01
(1,434)	1:A:129:THR:H	1:A:132:ILE:HD13	20	0.01
(1,429)	1:A:97:GLY:H	1:A:123:THR:HG21	15	0.01
(1,429)	1:A:97:GLY:H	1:A:123:THR:HG22	15	0.01
(1,429)	1:A:97:GLY:H	1:A:123:THR:HG23	15	0.01
(1,428)	1:A:97:GLY:H	1:A:123:THR:HB	5	0.01
(1,428)	1:A:97:GLY:H	1:A:123:THR:HB	8	0.01
(1,415)	1:A:88:ALA:H	1:A:116:VAL:HG21	18	0.01
(1,415)	1:A:88:ALA:H	1:A:116:VAL:HG22	18	0.01
(1,415)	1:A:88:ALA:H	1:A:116:VAL:HG23	18	0.01
(1,413)	1:A:53:THR:H	1:A:56:LEU:HD11	2	0.01
(1,413)	1:A:53:THR:H	1:A:56:LEU:HD12	2	0.01
(1,413)	1:A:53:THR:H	1:A:56:LEU:HD13	2	0.01
(1,413)	1:A:53:THR:H	1:A:56:LEU:HD11	5	0.01
(1,413)	1:A:53:THR:H	1:A:56:LEU:HD12	5	0.01
(1,413)	1:A:53:THR:H	1:A:56:LEU:HD13	5	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,413)	1:A:53:THR:H	1:A:56:LEU:HD11	11	0.01
(1,413)	1:A:53:THR:H	1:A:56:LEU:HD12	11	0.01
(1,413)	1:A:53:THR:H	1:A:56:LEU:HD13	11	0.01
(1,412)	1:A:53:THR:H	1:A:56:LEU:HB2	5	0.01
(1,400)	1:A:14:VAL:H	1:A:134:MET:HE1	3	0.01
(1,400)	1:A:14:VAL:H	1:A:134:MET:HE2	3	0.01
(1,400)	1:A:14:VAL:H	1:A:134:MET:HE3	3	0.01
(1,398)	1:A:121:MET:HE1	1:A:130:TYR:H	3	0.01
(1,398)	1:A:121:MET:HE2	1:A:130:TYR:H	3	0.01
(1,398)	1:A:121:MET:HE3	1:A:130:TYR:H	3	0.01
(1,398)	1:A:121:MET:HE1	1:A:130:TYR:H	5	0.01
(1,398)	1:A:121:MET:HE2	1:A:130:TYR:H	5	0.01
(1,398)	1:A:121:MET:HE3	1:A:130:TYR:H	5	0.01
(1,398)	1:A:121:MET:HE1	1:A:130:TYR:H	10	0.01
(1,398)	1:A:121:MET:HE2	1:A:130:TYR:H	10	0.01
(1,398)	1:A:121:MET:HE3	1:A:130:TYR:H	10	0.01
(1,396)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:118:VAL:H	6	0.01
(1,396)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:118:VAL:H	6	0.01
(1,396)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:118:VAL:H	6	0.01
(1,393)	1:A:96:THR:HG21	1:A:101:HIS:H	4	0.01
(1,393)	1:A:96:THR:HG22	1:A:101:HIS:H	4	0.01
(1,393)	1:A:96:THR:HG23	1:A:101:HIS:H	4	0.01
(1,393)	1:A:96:THR:HG21	1:A:101:HIS:H	5	0.01
(1,393)	1:A:96:THR:HG22	1:A:101:HIS:H	5	0.01
(1,393)	1:A:96:THR:HG23	1:A:101:HIS:H	5	0.01
(1,393)	1:A:96:THR:HG21	1:A:101:HIS:H	7	0.01
(1,393)	1:A:96:THR:HG22	1:A:101:HIS:H	7	0.01
(1,393)	1:A:96:THR:HG23	1:A:101:HIS:H	7	0.01
(1,379)	1:A:58:GLN:HG2	1:A:111:LEU:H	20	0.01
(1,379)	1:A:58:GLN:HG3	1:A:111:LEU:H	20	0.01
(1,367)	1:A:15:THR:HG21	1:A:26:GLN:H	19	0.01
(1,367)	1:A:15:THR:HG22	1:A:26:GLN:H	19	0.01
(1,367)	1:A:15:THR:HG23	1:A:26:GLN:H	19	0.01
(1,365)	1:A:14:VAL:HG21	1:A:23:GLU:H	6	0.01
(1,365)	1:A:14:VAL:HG22	1:A:23:GLU:H	6	0.01
(1,365)	1:A:14:VAL:HG23	1:A:23:GLU:H	6	0.01
(1,365)	1:A:14:VAL:HG21	1:A:23:GLU:H	18	0.01
(1,365)	1:A:14:VAL:HG22	1:A:23:GLU:H	18	0.01
(1,365)	1:A:14:VAL:HG23	1:A:23:GLU:H	18	0.01
(1,357)	1:A:23:GLU:HA	1:A:28:ARG:HA	14	0.01
(1,340)	1:A:33:ILE:HA	1:A:42:ALA:H	1	0.01
(1,340)	1:A:33:ILE:HA	1:A:42:ALA:H	2	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,340)	1:A:33:ILE:HA	1:A:42:ALA:H	4	0.01
(1,340)	1:A:33:ILE:HA	1:A:42:ALA:H	7	0.01
(1,340)	1:A:33:ILE:HA	1:A:42:ALA:H	10	0.01
(1,340)	1:A:33:ILE:HA	1:A:42:ALA:H	11	0.01
(1,340)	1:A:33:ILE:HA	1:A:42:ALA:H	13	0.01
(1,340)	1:A:33:ILE:HA	1:A:42:ALA:H	18	0.01
(1,299)	1:A:106:GLU:HA	1:A:109:ARG:HB2	18	0.01
(1,299)	1:A:106:GLU:HA	1:A:109:ARG:HB3	18	0.01
(1,23)	1:A:86:ALA:H	1:A:87:ASN:H	4	0.01
(1,221)	1:A:63:LEU:HD11	1:A:64:ALA:H	2	0.01
(1,221)	1:A:63:LEU:HD12	1:A:64:ALA:H	2	0.01
(1,221)	1:A:63:LEU:HD13	1:A:64:ALA:H	2	0.01
(1,2)	1:A:18:GLY:H	1:A:19:ASP:H	5	0.01
(1,1125)	1:A:144:LEU:O	1:A:33:ILE:H	2	0.01
(1,1125)	1:A:144:LEU:O	1:A:33:ILE:H	8	0.01
(1,1125)	1:A:144:LEU:O	1:A:33:ILE:H	9	0.01
(1,1122)	1:A:143:ALA:O	1:A:95:GLY:N	7	0.01
(1,1122)	1:A:143:ALA:O	1:A:95:GLY:N	8	0.01
(1,1122)	1:A:143:ALA:O	1:A:95:GLY:N	14	0.01
(1,1117)	1:A:139:ARG:O	1:A:91:VAL:H	4	0.01
(1,1117)	1:A:139:ARG:O	1:A:91:VAL:H	15	0.01
(1,1117)	1:A:139:ARG:O	1:A:91:VAL:H	20	0.01
(1,1116)	1:A:139:ARG:O	1:A:91:VAL:N	9	0.01
(1,1115)	1:A:132:ILE:O	1:A:136:GLU:H	11	0.01
(1,1115)	1:A:132:ILE:O	1:A:136:GLU:H	20	0.01
(1,1112)	1:A:130:TYR:O	1:A:134:MET:N	16	0.01
(1,1107)	1:A:127:ALA:O	1:A:131:ASN:H	5	0.01
(1,1107)	1:A:127:ALA:O	1:A:131:ASN:H	18	0.01
(1,1103)	1:A:125:ALA:O	1:A:129:THR:H	12	0.01
(1,1101)	1:A:124:GLN:O	1:A:128:ARG:H	1	0.01
(1,1099)	1:A:123:THR:O	1:A:127:ALA:H	3	0.01
(1,1099)	1:A:123:THR:O	1:A:127:ALA:H	10	0.01
(1,1094)	1:A:121:MET:O	1:A:96:THR:N	16	0.01
(1,1090)	1:A:117:GLY:O	1:A:92:LEU:N	12	0.01
(1,1090)	1:A:117:GLY:O	1:A:92:LEU:N	19	0.01
(1,1090)	1:A:117:GLY:O	1:A:92:LEU:N	20	0.01
(1,1080)	1:A:90:GLU:O	1:A:117:GLY:N	19	0.01
(1,1079)	1:A:57:LEU:O	1:A:61:ALA:H	19	0.01
(1,1079)	1:A:57:LEU:O	1:A:61:ALA:H	20	0.01
(1,1075)	1:A:55:SER:O	1:A:59:GLN:H	1	0.01
(1,1075)	1:A:55:SER:O	1:A:59:GLN:H	2	0.01
(1,1075)	1:A:55:SER:O	1:A:59:GLN:H	6	0.01



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1075)	1:A:55:SER:O	1:A:59:GLN:H	10	0.01
(1,1075)	1:A:55:SER:O	1:A:59:GLN:H	11	0.01
(1,1075)	1:A:55:SER:O	1:A:59:GLN:H	12	0.01
(1,1073)	1:A:54:ALA:O	1:A:58:GLN:H	3	0.01
(1,1071)	1:A:53:THR:O	1:A:57:LEU:H	8	0.01
(1,107)	1:A:147:ASP:HA	1:A:149:ASP:H	6	0.01
(1,1064)	1:A:34:ALA:O	1:A:42:ALA:N	2	0.01
(1,1064)	1:A:34:ALA:O	1:A:42:ALA:N	9	0.01
(1,1062)	1:A:33:ILE:O	1:A:144:LEU:N	6	0.01
(1,1060)	1:A:22:ILE:O	1:A:29:PHE:N	2	0.01
(1,1060)	1:A:22:ILE:O	1:A:29:PHE:N	8	0.01



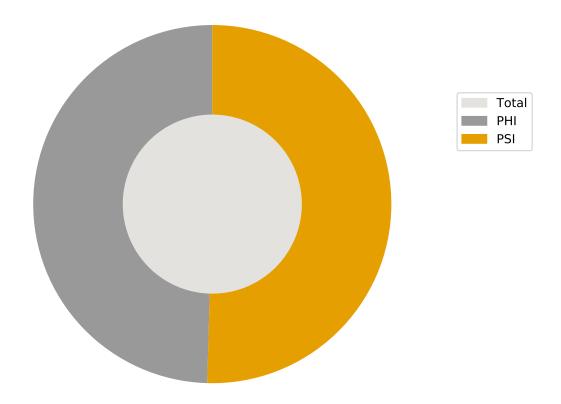
## 9 Dihedral angle restraints analysis

## 9.1 Dihedral angle restraints summary

Angle name	Count	%
PHI	55	49.5
PSI	56	50.5
Total	111	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.

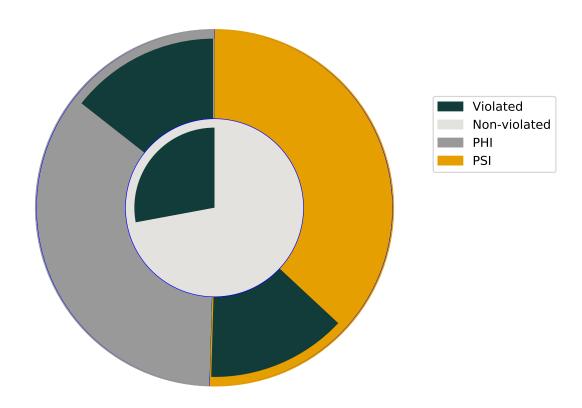
Angle name	Count	$\%^1$	$\%^2$
PHI	16	29.1	51.6
PSI	15	26.8	48.4



Angle name	Count	$\%^1$	$\%^2$
Total	31	27.9	100.0

 $<sup>^{1}</sup>$ percentage of violated restraints in that particular angle type,  $^{2}$ percentage of violation in total violations.

#### 9.2.1 Pie chart : Dihedral angle violations



# 9.3 Consistent dihedral angle violations

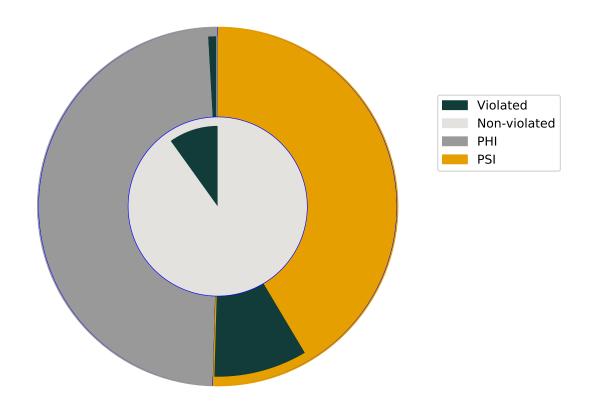
The following table provides the summary of consistently violated restraints. Restraints that are violated in all models are counted as consistently violated.

Angle name	Count	$\%^1$	$\%^2$
PHI	1	1.8	9.1
PSI	10	17.9	90.9
Total	11	9.9	100.0

 $^{1}$ percentage of violated restraints in that particular angle 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 $(\circ)$	Avg. No. of violated restraints per model	$   \text{Max violation } (\circ) $
0.0-5.0	3.4	5.0
5.0-10.0	1.1	10.0
10.0-20.0	2.8	19.62
20.0-40.0	8.3	39.73
40.0-80.0	None	None
80.0<	None	None

## 9.5 Dihedral angle violations in the ensemble

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

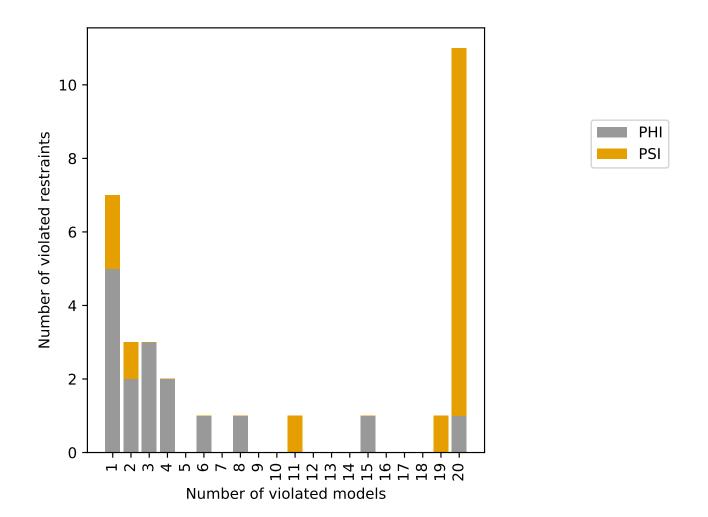
No.	of vio	lated restraints	No. of violated models
PHI	PSI	Total	No. of violated models
5	2	7	1



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

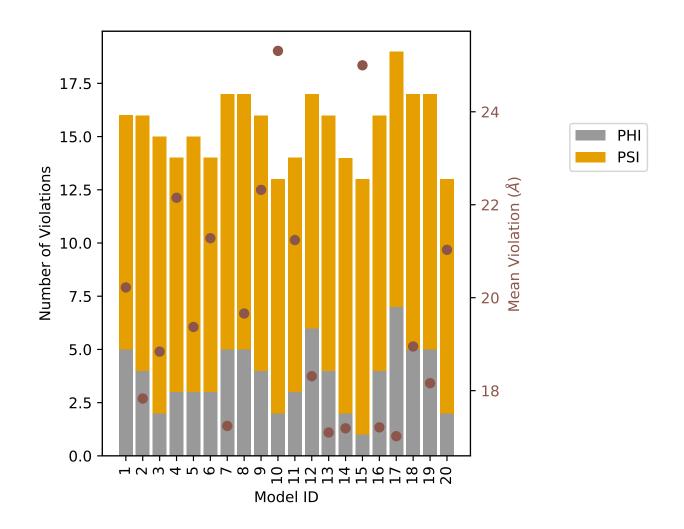
Model ID	No.	of vic	$_{ m lations}$	Moon (a)	Max (∘)
Model 1D	PHI	PSI	Total	$\mathbf{Mean} \; (\circ)$	Max (0)
1	5	11	16	20.22	39.27
2	4	12	16	17.83	39.68
3	2	13	15	18.84	38.22
4	3	11	14	22.15	36.36
5	3	12	15	19.37	39.03
6	3	11	14	21.28	39.56
7	5	12	17	17.24	38.64
8	5	12	17	19.66	38.91
9	4	12	16	22.32	39.73



Continued from previous page...

Model ID	No. of violations			Moon (a)	Mov (a)
Wiodei 1D	PHI	PSI	Total	$\mathbf{Mean} \; (\circ)$	$\operatorname{Max}(\circ)$
10	2	11	13	25.31	37.22
11	3	11	14	21.24	34.96
12	6	11	17	18.31	39.65
13	4	12	16	17.1	37.08
14	2	12	14	17.19	38.35
15	1	12	13	25.0	36.68
16	4	12	16	17.21	38.07
17	7	12	19	17.02	35.77
18	5	12	17	18.95	37.51
19	5	12	17	18.16	35.55
20	2	11	13	21.03	37.24

### 9.6.1 Bar graph: Violations in each model

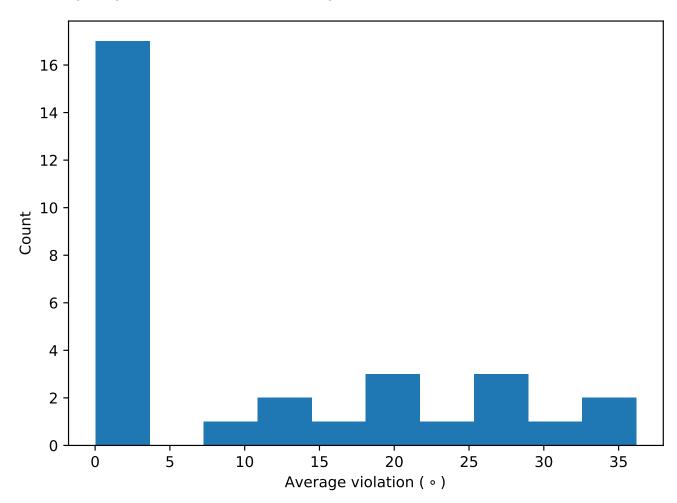




## 9.7 Most violated dihedral angle restraints

### 9.7.1 Histogram: Distribution of mean dihedral angle violations

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



#### 9.7.2 Table: Most violated dihedral angle restraints

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	$\mathbf{Mean} \; (\; \circ \; )$	Max (∘)
(1,4)	1:A:21:TYR:N	1:A:21:TYR:CA	1:A:21:TYR:C	1:A:22:ILE:N	20	27.96	39.73
(1,14)	1:A:31:HIS:N	1:A:31:HIS:CA	1:A:31:HIS:C	1:A:32:ALA:N	20	31.56	39.68
(1,20)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	1:A:36:ALA:N	20	36.18	39.65
(1,50)	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	1:A:92:LEU:N	20	32.9	39.55
(1,58)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	20	18.29	38.5
(1,16)	1:A:33:ILE:N	1:A:33:ILE:CA	1:A:33:ILE:C	1:A:34:ALA:N	20	27.06	38.22
(1,28)	1:A:44:TRP:N	1:A:44:TRP:CA	1:A:44:TRP:C	1:A:45:PRO:N	20	17.64	37.51
(1,48)	1:A:84:ARG:N	1:A:84:ARG:CA	1:A:84:ARG:C	1:A:85:PRO:N	19	23.29	37.08
(1,99)	1:A:140:VAL:N	1:A:140:VAL:CA	1:A:140:VAL:C	1:A:141:VAL:N	20	27.45	35.31
(1,107)	1:A:144:LEU:N	1:A:144:LEU:CA	1:A:144:LEU:C	1:A:145:LEU:N	20	18.93	28.58



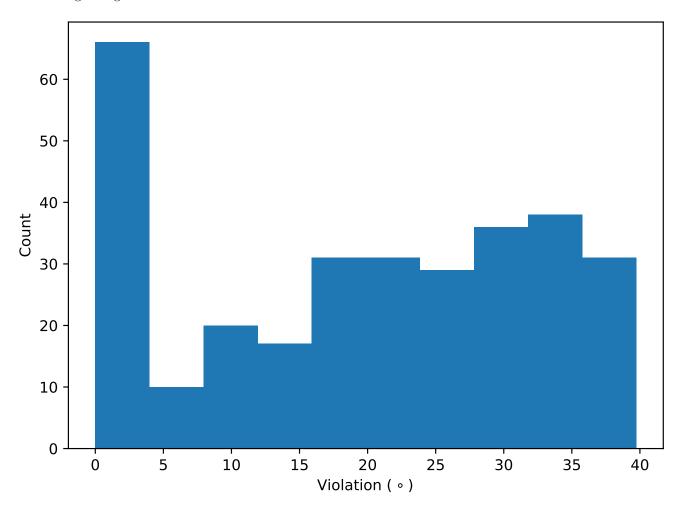
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean ( o )	Max ( o )
(1,73)	1:A:121:MET:N	1:A:121:MET:CA	1:A:121:MET:C	1:A:122:ASP:N	11	12.22	28.06
(1,18)	1:A:34:ALA:N	1:A:34:ALA:CA	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	20	11.58	23.98
(1,111)	1:A:148:GLY:N	1:A:148:GLY:CA	1:A:148:GLY:C	1:A:149:ASP:N	2	0.3	0.45
(1,46)	1:A:71:LEU:N	1:A:71:LEU:CA	1:A:71:LEU:C	1:A:72:ALA:N	1	0.16	0.16
(1,10)	1:A:24:VAL:N	1:A:24:VAL:CA	1:A:24:VAL:C	1:A:25:ASN:N	1	0.13	0.13
(1,19)	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	20	20.5	29.81
(1,110)	1:A:147:ASP:C	1:A:148:GLY:N	1:A:148:GLY:CA	1:A:148:GLY:C	8	8.41	17.91
(1,57)	1:A:103:LEU:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	15	0.23	0.68
(1,13)	1:A:30:SER:C	1:A:31:HIS:N	1:A:31:HIS:CA	1:A:31:HIS:C	2	0.28	0.47
(1,47)	1:A:83:ALA:C	1:A:84:ARG:N	1:A:84:ARG:CA	1:A:84:ARG:C	4	0.14	0.38
(1,21)	1:A:35:PHE:C	1:A:36:ALA:N	1:A:36:ALA:CA	1:A:36:ALA:C	6	0.17	0.35
(1,29)	1:A:45:PRO:C	1:A:46:VAL:N	1:A:46:VAL:CA	1:A:46:VAL:C	3	0.23	0.35
(1,27)	1:A:43:SER:C	1:A:44:TRP:N	1:A:44:TRP:CA	1:A:44:TRP:C	3	0.21	0.3
(1,31)	1:A:49:PRO:C	1:A:50:ALA:N	1:A:50:ALA:CA	1:A:50:ALA:C	1	0.19	0.19
(1,62)	1:A:106:GLU:C	1:A:107:GLN:N	1:A:107:GLN:CA	1:A:107:GLN:C	4	0.11	0.18
(1,106)	1:A:143:ALA:C	1:A:144:LEU:N	1:A:144:LEU:CA	1:A:144:LEU:C	3	0.1	0.18
(1,25)	1:A:42:ALA:C	1:A:43:SER:N	1:A:43:SER:CA	1:A:43:SER:C	2	0.13	0.16
(1,60)	1:A:105:PRO:C	1:A:106:GLU:N	1:A:106:GLU:CA	1:A:106:GLU:C	1	0.11	0.11
(1,7)	1:A:22:ILE:C	1:A:23:GLU:N	1:A:23:GLU:CA	1:A:23:GLU:C	1	0.11	0.11
(1,23)	1:A:40:PRO:C	1:A:41:VAL:N	1:A:41:VAL:CA	1:A:41:VAL:C	1	0.05	0.05
(1,5)	1:A:21:TYR:C	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:C	1	0.03	0.03



## 9.8 All violated dihedral angleeee restraints

### 9.8.1 Histogram : Distribution of violations

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



#### 9.8.2 Table: All violated dihedral angle restraints

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \ )$
(1,4)	1:A:21:TYR:N	1:A:21:TYR:CA	1:A:21:TYR:C	1:A:22:ILE:N	9	39.73
(1,14)	1:A:31:HIS:N	1:A:31:HIS:CA	1:A:31:HIS:C	1:A:32:ALA:N	2	39.68
(1,20)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	1:A:36:ALA:N	12	39.65
(1,14)	1:A:31:HIS:N	1:A:31:HIS:CA	1:A:31:HIS:C	1:A:32:ALA:N	6	39.56
(1,50)	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	1:A:92:LEU:N	6	39.55
(1,20)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	1:A:36:ALA:N	1	39.27
(1,4)	1:A:21:TYR:N	1:A:21:TYR:CA	1:A:21:TYR:C	1:A:22:ILE:N	5	39.03
(1,20)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	1:A:36:ALA:N	8	38.91
(1,4)	1:A:21:TYR:N	1:A:21:TYR:CA	1:A:21:TYR:C	1:A:22:ILE:N	7	38.64
(1,58)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	9	38.5



Key	$rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( $\circ$ )
(1,14)	1:A:31:HIS:N	1:A:31:HIS:CA	1:A:31:HIS:C	1:A:32:ALA:N	14	38.35
(1,16)	1:A:33:ILE:N	1:A:33:ILE:CA	1:A:33:ILE:C	1:A:34:ALA:N	3	38.22
(1,20)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	1:A:36:ALA:N	7	38.09
(1,14)	1:A:31:HIS:N	1:A:31:HIS:CA	1:A:31:HIS:C	1:A:32:ALA:N	16	38.07
(1,50)	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	1:A:92:LEU:N	9	37.57
(1,20)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	1:A:36:ALA:N	6	37.54
(1,28)	1:A:44:TRP:N	1:A:44:TRP:CA	1:A:44:TRP:C	1:A:45:PRO:N	18	37.51
(1,20)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	1:A:36:ALA:N	20	37.24
(1,20)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	1:A:36:ALA:N	10	37.22
(1,48)	1:A:84:ARG:N	1:A:84:ARG:CA	1:A:84:ARG:C	1:A:85:PRO:N	13	37.08
(1,16)	1:A:33:ILE:N	1:A:33:ILE:CA	1:A:33:ILE:C	1:A:34:ALA:N	15	36.68
(1,50)	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	1:A:92:LEU:N	10	36.46
(1,20)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	1:A:36:ALA:N	4	36.36
(1,20)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	1:A:36:ALA:N	9	36.36
(1,20)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	1:A:36:ALA:N	3	36.31
(1,4)	1:A:21:TYR:N	1:A:21:TYR:CA	1:A:21:TYR:C	1:A:22:ILE:N	10	36.29
(1,20)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	1:A:36:ALA:N	2	36.28
(1,4)	1:A:21:TYR:N	1:A:21:TYR:CA	1:A:21:TYR:C	1:A:22:ILE:N	18	36.27
(1,48)	1:A:84:ARG:N	1:A:84:ARG:CA	1:A:84:ARG:C	1:A:85:PRO:N	12	36.04
(1,20)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	1:A:36:ALA:N	5	35.97
(1,20)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	1:A:36:ALA:N	17	35.77
(1,16)	1:A:33:ILE:N	1:A:33:ILE:CA	1:A:33:ILE:C	1:A:34:ALA:N	19	35.55
(1,20)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	1:A:36:ALA:N	19	35.54
(1,14)	1:A:31:HIS:N	1:A:31:HIS:CA	1:A:31:HIS:C	1:A:32:ALA:N	7	35.46
(1,20)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	1:A:36:ALA:N	15	35.42
(1,99)	1:A:140:VAL:N	1:A:140:VAL:CA	1:A:140:VAL:C	1:A:141:VAL:N	8	35.31
(1,20)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	1:A:36:ALA:N	11	34.96
(1,20)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	1:A:36:ALA:N	13	34.94
(1,50)	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	1:A:92:LEU:N	2	34.91
(1,20)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	1:A:36:ALA:N	16	34.91
(1,14)	1:A:31:HIS:N	1:A:31:HIS:CA	1:A:31:HIS:C	1:A:32:ALA:N	18	34.91
(1,50)	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	1:A:92:LEU:N	4	34.66
(1,4)	1:A:21:TYR:N	1:A:21:TYR:CA	1:A:21:TYR:C	1:A:22:ILE:N	13	34.49
(1,14)	1:A:31:HIS:N	1:A:31:HIS:CA	1:A:31:HIS:C	1:A:32:ALA:N	8	34.46
(1,50)	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	1:A:92:LEU:N	12	34.36
(1,4)	1:A:21:TYR:N	1:A:21:TYR:CA	1:A:21:TYR:C	1:A:22:ILE:N	8	34.36
(1,58)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	10	34.33
(1,20)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	1:A:36:ALA:N	18	34.23
(1,14)	1:A:31:HIS:N	1:A:31:HIS:CA	1:A:31:HIS:C	1:A:32:ALA:N	10	34.16
(1,50)	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	1:A:92:LEU:N	20	34.13
(1,14)	1:A:31:HIS:N	1:A:31:HIS:CA	1:A:31:HIS:C	1:A:32:ALA:N	4	33.97
(1,50)	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	1:A:92:LEU:N	16	33.78
(1,48)	1:A:84:ARG:N	1:A:84:ARG:CA	1:A:84:ARG:C	1:A:85:PRO:N	9	33.73
(1,50)	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	1:A:92:LEU:N	14	33.56
(1,58)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	1	33.55
(1,50)	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	1:A:92:LEU:N	7	33.54
(1,14)	1:A:31:HIS:N	1:A:31:HIS:CA	1:A:31:HIS:C	1:A:32:ALA:N	13	33.02
(1,50)	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	1:A:92:LEU:N	15	32.99
(1,16)	1:A:33:ILE:N	1:A:33:ILE:CA	1:A:33:ILE:C	1:A:34:ALA:N	16	32.97
(1,99)	1:A:140:VAL:N	1:A:140:VAL:CA	1:A:140:VAL:C	1:A:141:VAL:N	4	32.9
(1,4)	1:A:21:TYR:N	1:A:21:TYR:CA	1:A:21:TYR:C	1:A:22:ILE:N	20	32.85



	ed from previous po					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation $(\circ)$
(1,99)	1:A:140:VAL:N	1:A:140:VAL:CA	1:A:140:VAL:C	1:A:141:VAL:N	19	32.76
(1,50)	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	1:A:92:LEU:N	11	32.69
(1,4)	1:A:21:TYR:N	1:A:21:TYR:CA	1:A:21:TYR:C	1:A:22:ILE:N	2	32.49
(1,50)	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	1:A:92:LEU:N	13	32.2
(1,16)	1:A:33:ILE:N	1:A:33:ILE:CA	1:A:33:ILE:C	1:A:34:ALA:N	8	32.13
(1,14)	1:A:31:HIS:N	1:A:31:HIS:CA	1:A:31:HIS:C	1:A:32:ALA:N	20	32.13
(1,58)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	11	32.05
(1,48)	1:A:84:ARG:N	1:A:84:ARG:CA	1:A:84:ARG:C	1:A:85:PRO:N	1	31.8
(1,99)	1:A:140:VAL:N	1:A:140:VAL:CA	1:A:140:VAL:C	1:A:141:VAL:N	9	31.57
(1,48)	1:A:84:ARG:N	1:A:84:ARG:CA	1:A:84:ARG:C	1:A:85:PRO:N	18	31.56
(1,48)	1:A:84:ARG:N	1:A:84:ARG:CA	1:A:84:ARG:C	1:A:85:PRO:N	15	31.41
(1,14)	1:A:31:HIS:N	1:A:31:HIS:CA	1:A:31:HIS:C	1:A:32:ALA:N	9	31.29
(1,28)	1:A:44:TRP:N	1:A:44:TRP:CA	1:A:44:TRP:C	1:A:45:PRO:N	6	31.28
(1,50)	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	1:A:92:LEU:N	17	30.99
(1,99)	1:A:140:VAL:N	1:A:140:VAL:CA	1:A:140:VAL:C	1:A:141:VAL:N	15	30.87
(1,50)	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	1:A:92:LEU:N	19	30.82
(1,50)	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	1:A:92:LEU:N	18	30.76
(1,14)	1:A:31:HIS:N	1:A:31:HIS:CA	1:A:31:HIS:C	1:A:32:ALA:N	17	30.69
(1,99)	1:A:140:VAL:N	1:A:140:VAL:CA	1:A:140:VAL:C	1:A:141:VAL:N	20	30.59
(1,14)	1:A:31:HIS:N	1:A:31:HIS:CA	1:A:31:HIS:C	1:A:32:ALA:N	1	30.55
(1,16)	1:A:33:ILE:N	1:A:33:ILE:CA	1:A:33:ILE:C	1:A:34:ALA:N	12	30.43
(1,50)	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	1:A:92:LEU:N	8	30.28
(1,14)	1:A:31:HIS:N	1:A:31:HIS:CA	1:A:31:HIS:C	1:A:32:ALA:N	11	30.12
(1,99)	1:A:140:VAL:N	1:A:140:VAL:CA	1:A:140:VAL:C	1:A:141:VAL:N	5	29.98
(1,14)	1:A:31:HIS:N	1:A:31:HIS:CA	1:A:31:HIS:C	1:A:32:ALA:N	15	29.9
(1,48)	1:A:84:ARG:N	1:A:84:ARG:CA	1:A:84:ARG:C	1:A:85:PRO:N	2	29.85
(1,19)	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	12	29.81
(1,16)	1:A:33:ILE:N	1:A:33:ILE:CA	1:A:33:ILE:C	1:A:34:ALA:N	2	29.71
(1,16) $(1,16)$	1:A:33:ILE:N	1:A:33:ILE:CA	1:A:33:ILE:C	1:A:34:ALA:N 1:A:34:ALA:N	1	29.66
(1,14)	1:A:31:HIS:N	1:A:31:HIS:CA	1:A:31:HIS:C	1:A:32:ALA:N	5	29.55
(1,14) $(1,58)$	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	15	29.36
(1,36) $(1,16)$	1:A:33:ILE:N	1:A:33:ILE:CA	1:A:33:ILE:C	1:A:34:ALA:N	10	29.05
· · /	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	1:A:92:LEU:N	3	28.98
(1,50)	1:A:44:TRP:N	1:A:44:TRP:CA	1:A:44:TRP:C	1:A:45:PRO:N	20	28.84
(1,28)		1:A:44:1 RP:CA 1:A:140:VAL:CA	1:A:140:VAL:C		1	28.59
(1,99)				1:A:141:VAL:N		
(1,20)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	1:A:36:ALA:N	14	28.58
(1,107)	1:A:144:LEU:N	1:A:144:LEU:CA	1:A:144:LEU:C	1:A:145:LEU:N	1	28.58
(1,48)	1:A:84:ARG:N	1:A:84:ARG:CA	1:A:84:ARG:C	1:A:85:PRO:N	19	28.42
(1,50)	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	1:A:92:LEU:N	1	28.22
(1,99)	1:A:140:VAL:N	1:A:140:VAL:CA	1:A:140:VAL:C	1:A:141:VAL:N	12	28.18
(1,73)	1:A:121:MET:N	1:A:121:MET:CA	1:A:121:MET:C	1:A:122:ASP:N	17	28.06
(1,4)	1:A:21:TYR:N	1:A:21:TYR:CA	1:A:21:TYR:C	1:A:22:ILE:N	15	28.0
(1,99)	1:A:140:VAL:N	1:A:140:VAL:CA	1:A:140:VAL:C	1:A:141:VAL:N	6	27.94
(1,107)	1:A:144:LEU:N	1:A:144:LEU:CA	1:A:144:LEU:C	1:A:145:LEU:N	19	27.93
(1,107)	1:A:144:LEU:N	1:A:144:LEU:CA	1:A:144:LEU:C	1:A:145:LEU:N	11	27.71
(1,19)	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	19	27.65
(1,99)	1:A:140:VAL:N	1:A:140:VAL:CA	1:A:140:VAL:C	1:A:141:VAL:N	17	27.58
(1,50)	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	1:A:92:LEU:N	5	27.54
(1,19)	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	4	27.51
(1,16)	1:A:33:ILE:N	1:A:33:ILE:CA	1:A:33:ILE:C	1:A:34:ALA:N	4	27.18
(1,99)	1:A:140:VAL:N	1:A:140:VAL:CA	1:A:140:VAL:C	1:A:141:VAL:N	14	27.06
					Continu	ed on next page



	ed from previous po				35 11	
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation $(\circ)$
(1,99)	1:A:140:VAL:N	1:A:140:VAL:CA	1:A:140:VAL:C	1:A:141:VAL:N	11	27.04
(1,16)	1:A:33:ILE:N	1:A:33:ILE:CA	1:A:33:ILE:C	1:A:34:ALA:N	5	26.84
(1,16)	1:A:33:ILE:N	1:A:33:ILE:CA	1:A:33:ILE:C	1:A:34:ALA:N	7	26.82
(1,16)	1:A:33:ILE:N	1:A:33:ILE:CA	1:A:33:ILE:C	1:A:34:ALA:N	11	26.78
(1,48)	1:A:84:ARG:N	1:A:84:ARG:CA	1:A:84:ARG:C	1:A:85:PRO:N	4	26.61
(1,16)	1:A:33:ILE:N	1:A:33:ILE:CA	1:A:33:ILE:C	1:A:34:ALA:N	9	26.47
(1,73)	1:A:121:MET:N	1:A:121:MET:CA	1:A:121:MET:C	1:A:122:ASP:N	9	26.4
(1,4)	1:A:21:TYR:N	1:A:21:TYR:CA	1:A:21:TYR:C	1:A:22:ILE:N	17	26.25
(1,99)	1:A:140:VAL:N	1:A:140:VAL:CA	1:A:140:VAL:C	1:A:141:VAL:N	10	26.21
(1,48)	1:A:84:ARG:N	1:A:84:ARG:CA	1:A:84:ARG:C	1:A:85:PRO:N	17	25.93
(1,4)	1:A:21:TYR:N	1:A:21:TYR:CA	1:A:21:TYR:C	1:A:22:ILE:N	14	25.63
(1,19)	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	3	25.58
(1,107)	1:A:144:LEU:N	1:A:144:LEU:CA	1:A:144:LEU:C	1:A:145:LEU:N	15	25.5
(1,4)	1:A:21:TYR:N	1:A:21:TYR:CA	1:A:21:TYR:C	1:A:22:ILE:N	6	25.37
(1,99)	1:A:140:VAL:N	1:A:140:VAL:CA	1:A:140:VAL:C	1:A:141:VAL:N	7	25.32
(1,99)	1:A:140:VAL:N	1:A:140:VAL:CA	1:A:140:VAL:C	1:A:141:VAL:N	16	25.3
(1,99)	1:A:140:VAL:N	1:A:140:VAL:CA	1:A:140:VAL:C	1:A:141:VAL:N	3	25.22
(1,19)	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	17	25.03
(1,73)	1:A:121:MET:N	1:A:121:MET:CA	1:A:121:MET:C	1:A:122:ASP:N	10	24.47
(1,107)	1:A:144:LEU:N	1:A:144:LEU:CA	1:A:144:LEU:C	1:A:145:LEU:N	4	24.42
(1,19)	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	5	24.23
(1,18)	1:A:34:ALA:N	1:A:34:ALA:CA	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	19	23.98
(1,58)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	12	23.76
(1,58)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	8	23.59
(1,28)	1:A:44:TRP:N	1:A:44:TRP:CA	1:A:44:TRP:C	1:A:45:PRO:N	14	23.54
(1,4)	1:A:21:TYR:N	1:A:21:TYR:CA	1:A:21:TYR:C	1:A:22:ILE:N	1	23.46
(1,19)	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	16	23.46
(1,28)	1:A:44:TRP:N	1:A:44:TRP:CA	1:A:44:TRP:C	1:A:45:PRO:N	19	23.38
(1,19)	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	10	23.1
(1,19)	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	8	23.04
(1,19)	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	20	23.03
(1,13) $(1,4)$	1:A:21:TYR:N	1:A:21:TYR:CA	1:A:21:TYR:C	1:A:22:ILE:N	11	23.01
(1,107)	1:A:144:LEU:N	1:A:144:LEU:CA	1:A:144:LEU:C	1:A:145:LEU:N	14	23.0
(1,107) $(1,107)$	1:A:144:LEU:N	1:A:144:LEU:CA	1:A:144:LEU:C	1:A:145:LEU:N	12	22.97
(1,107) $(1,14)$	1:A:31:HIS:N	1:A:31:HIS:CA	1:A:31:HIS:C	1:A:32:ALA:N	3	22.88
(1,14) $(1,99)$	1:A:140:VAL:N	1:A:140:VAL:CA	1:A:140:VAL:C	1:A:141:VAL:N	18	22.77
(1,33) $(1,4)$	1:A:21:TYR:N	1:A:21:TYR:CA	1:A:21:TYR:C	1:A:22:ILE:N	3	22.52
(1,19)	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	6	21.98
(1,19) $(1,28)$	1:A:44:TRP:N	1:A:44:TRP:CA	1:A:44:TRP:C	1:A:45:PRO:N	1	21.98
(1,28) $(1,107)$	1:A:144:LEU:N	1:A:144:LEU:CA	1:A:144:LEU:C	1:A:45:FRO:N 1:A:145:LEU:N	18	21.85
(1,107) $(1,48)$	1:A:84:ARG:N	1:A:144:LEU:CA 1:A:84:ARG:CA	1:A:84:ARG:C	1:A:45:LEU:N 1:A:85:PRO:N	8	21.84
(1,48) $(1,48)$	1:A:84:ARG:N	1:A:84:ARG:CA 1:A:84:ARG:CA	1:A:84:ARG:C	1:A:85:PRO:N	7	21.75
(1,48) $(1,16)$	1:A:33:ILE:N	1:A:33:ILE:CA	1:A:33:ILE:C	1:A:34:ALA:N	6	21.75
. , ,	1:A:33:ILE:N 1:A:34:ALA:C	1:A:35:ILE:CA 1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:34:ALA:N 1:A:35:PHE:C	13	21.75
(1,19) $(1,28)$	1:A:34:ALA:C 1:A:44:TRP:N	1:A:44:TRP:CA	1:A:35:PHE:CA 1:A:44:TRP:C	1:A:35:PHE:C 1:A:45:PRO:N	17	21.67
_ ` ′	1:A:44:1RP:N 1:A:34:ALA:N	1:A:34:ALA:CA	1:A:44:1RP:C 1:A:34:ALA:C		12	21.48
(1,18)	1:A:34:ALA:N 1:A:34:ALA:C			1:A:35:PHE:N		
(1,19)		1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	15 12	21.39
(1,14)	1:A:31:HIS:N	1:A:31:HIS:CA	1:A:31:HIS:C	1:A:32:ALA:N		21.28
(1,18)	1:A:34:ALA:N	1:A:34:ALA:CA	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	3	20.94
(1,99)	1:A:140:VAL:N	1:A:140:VAL:CA	1:A:140:VAL:C	1:A:141:VAL:N	2	20.88
(1,16)	1:A:33:ILE:N	1:A:33:ILE:CA	1:A:33:ILE:C	1:A:34:ALA:N	13	ed on next page



	ed from previous po					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation $(\circ)$
(1,58)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	3	20.64
(1,58)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	6	20.12
(1,4)	1:A:21:TYR:N	1:A:21:TYR:CA	1:A:21:TYR:C	1:A:22:ILE:N	16	19.62
(1,4)	1:A:21:TYR:N	1:A:21:TYR:CA	1:A:21:TYR:C	1:A:22:ILE:N	19	19.59
(1,16)	1:A:33:ILE:N	1:A:33:ILE:CA	1:A:33:ILE:C	1:A:34:ALA:N	14	19.49
(1,73)	1:A:121:MET:N	1:A:121:MET:CA	1:A:121:MET:C	1:A:122:ASP:N	5	19.42
(1,48)	1:A:84:ARG:N	1:A:84:ARG:CA	1:A:84:ARG:C	1:A:85:PRO:N	11	19.34
(1,28)	1:A:44:TRP:N	1:A:44:TRP:CA	1:A:44:TRP:C	1:A:45:PRO:N	12	18.95
(1,19)	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	9	18.95
(1,19)	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	11	18.93
(1,107)	1:A:144:LEU:N	1:A:144:LEU:CA	1:A:144:LEU:C	1:A:145:LEU:N	8	18.92
(1,107)	1:A:144:LEU:N	1:A:144:LEU:CA	1:A:144:LEU:C	1:A:145:LEU:N	10	18.9
(1,28)	1:A:44:TRP:N	1:A:44:TRP:CA	1:A:44:TRP:C	1:A:45:PRO:N	2	18.39
(1,107)	1:A:144:LEU:N	1:A:144:LEU:CA	1:A:144:LEU:C	1:A:145:LEU:N	5	18.39
(1,16)	1:A:33:ILE:N	1:A:33:ILE:CA	1:A:33:ILE:C	1:A:34:ALA:N	17	18.38
(1,48)	1:A:84:ARG:N	1:A:84:ARG:CA	1:A:84:ARG:C	1:A:85:PRO:N	16	18.35
(1,48)	1:A:84:ARG:N	1:A:84:ARG:CA	1:A:84:ARG:C	1:A:85:PRO:N	6	18.33
(1,4)	1:A:21:TYR:N	1:A:21:TYR:CA	1:A:21:TYR:C	1:A:22:ILE:N	4	18.16
(1,16)	1:A:33:ILE:N	1:A:33:ILE:CA	1:A:33:ILE:C	1:A:34:ALA:N	18	18.07
(1,28)	1:A:44:TRP:N	1:A:44:TRP:CA	1:A:44:TRP:C	1:A:45:PRO:N	4	18.01
(1,110)	1:A:147:ASP:C	1:A:148:GLY:N	1:A:148:GLY:CA	1:A:148:GLY:C	17	17.91
(1,58)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	13	17.81
(1,28)	1:A:44:TRP:N	1:A:44:TRP:CA	1:A:44:TRP:C	1:A:45:PRO:N	16	17.74
(1,18)	1:A:34:ALA:N	1:A:34:ALA:CA	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	16	17.64
(1,107)	1:A:144:LEU:N	1:A:144:LEU:CA	1:A:144:LEU:C	1:A:145:LEU:N	7	17.53
(1,58)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	7	17.29
(1,107)	1:A:144:LEU:N	1:A:144:LEU:CA	1:A:144:LEU:C	1:A:145:LEU:N	17	16.92
(1,110)	1:A:147:ASP:C	1:A:148:GLY:N	1:A:148:GLY:CA	1:A:148:GLY:C	18	16.76
(1,110) $(1,107)$	1:A:144:LEU:N	1:A:144:LEU:CA	1:A:144:LEU:C	1:A:145:LEU:N	9	16.4
(1,48)	1:A:84:ARG:N	1:A:84:ARG:CA	1:A:84:ARG:C	1:A:85:PRO:N	3	16.21
(1,58)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	20	16.19
(1,18)	1:A:34:ALA:N	1:A:34:ALA:CA	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	8	16.14
(1,18)	1:A:34:ALA:N	1:A:34:ALA:CA	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	5	16.01
(1,18)	1:A:34:ALA:N	1:A:34:ALA:CA	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	10	15.31
(1,58)		1:A:104:GLY:CA		1:A:105:PRO:N	18	14.74
(1,19)	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	2	14.55
(1,18)	1:A:34:ALA:N	1:A:34:ALA:CA	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	15	14.38
(1,107) $(1,107)$	1:A:144:LEU:N	1:A:144:LEU:CA	1:A:144:LEU:C	1:A:145:LEU:N	3	14.34
(1,167) $(1,16)$	1:A:33:ILE:N	1:A:33:ILE:CA	1:A:33:ILE:C	1:A:34:ALA:N	20	14.28
(1,10) $(1,107)$	1:A:144:LEU:N	1:A:144:LEU:CA	1:A:144:LEU:C	1:A:145:LEU:N	6	14.22
(1,107) $(1,19)$	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	18	14.05
(1,19) $(1,28)$	1:A:44:TRP:N	1:A:44:TRP:CA	1:A:44:TRP:C	1:A:45:PRO:N	5	13.5
(1,28) $(1,19)$	1:A:34:ALA:C	1:A:44:1 RP:CA 1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	7	13.43
( ' /	1:A:34:ALA:C 1:A:34:ALA:N	1:A:33:PHE:N 1:A:34:ALA:CA	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	4	13.43
(1,18)	1:A:34:ALA:N 1:A:44:TRP:N	1:A:44:TRP:CA	1:A:34:ALA:C 1:A:44:TRP:C	1:A:35:PHE:N 1:A:45:PRO:N	10	13.42
(1,28)	1:A:44:1RP:N 1:A:121:MET:N	1:A:44:1 RP:CA 1:A:121:MET:CA	1:A:44:1RF:C 1:A:121:MET:C	1:A:45:PRO:N 1:A:122:ASP:N	8	
(1,73)	1:A:121:ME1:N 1:A:140:VAL:N	1:A:121:ME1:CA 1:A:140:VAL:CA	1:A:121:ME1:C 1:A:140:VAL:C		13	13.1
(1,99)				1:A:141:VAL:N		12.85
(1,18)	1:A:34:ALA:N	1:A:34:ALA:CA	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	11	12.52
(1,28)	1:A:44:TRP:N	1:A:44:TRP:CA	1:A:44:TRP:C	1:A:45:PRO:N	11	12.05
(1,18)	1:A:34:ALA:N	1:A:34:ALA:CA	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	20 20	11.97 11.62
(1,107)	1:A:144:LEU:N	1:A:144:LEU:CA	1:A:144:LEU:C	1:A:145:LEU:N		ed on next page



	ed from previous po					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation $(\circ)$
(1,28)	1:A:44:TRP:N	1:A:44:TRP:CA	1:A:44:TRP:C	1:A:45:PRO:N	8	11.52
(1,18)	1:A:34:ALA:N	1:A:34:ALA:CA	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	17	11.21
(1,14)	1:A:31:HIS:N	1:A:31:HIS:CA	1:A:31:HIS:C	1:A:32:ALA:N	19	11.08
(1,19)	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	1	10.98
(1,73)	1:A:121:MET:N	1:A:121:MET:CA	1:A:121:MET:C	1:A:122:ASP:N	7	10.84
(1,48)	1:A:84:ARG:N	1:A:84:ARG:CA	1:A:84:ARG:C	1:A:85:PRO:N	14	10.61
(1,18)	1:A:34:ALA:N	1:A:34:ALA:CA	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	9	10.37
(1,107)	1:A:144:LEU:N	1:A:144:LEU:CA	1:A:144:LEU:C	1:A:145:LEU:N	13	10.0
(1,107)	1:A:144:LEU:N	1:A:144:LEU:CA	1:A:144:LEU:C	1:A:145:LEU:N	2	9.86
(1,28)	1:A:44:TRP:N	1:A:44:TRP:CA	1:A:44:TRP:C	1:A:45:PRO:N	9	9.68
(1,107)	1:A:144:LEU:N	1:A:144:LEU:CA	1:A:144:LEU:C	1:A:145:LEU:N	16	9.47
(1,110)	1:A:147:ASP:C	1:A:148:GLY:N	1:A:148:GLY:CA	1:A:148:GLY:C	2	9.4
(1,110)	1:A:147:ASP:C	1:A:148:GLY:N	1:A:148:GLY:CA	1:A:148:GLY:C	1	9.37
(1,58)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	4	9.06
(1,18)	1:A:34:ALA:N	1:A:34:ALA:CA	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	13	9.02
(1,28)	1:A:44:TRP:N	1:A:44:TRP:CA	1:A:44:TRP:C	1:A:45:PRO:N	13	8.9
(1,58)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	14	8.79
(1,28)	1:A:44:TRP:N	1:A:44:TRP:CA	1:A:44:TRP:C	1:A:45:PRO:N	3	8.71
(1,28)	1:A:44:TRP:N	1:A:44:TRP:CA	1:A:44:TRP:C	1:A:45:PRO:N	15	8.14
(1,110)	1:A:147:ASP:C	1:A:148:GLY:N	1:A:148:GLY:CA	1:A:148:GLY:C	4	7.73
(1,18)	1:A:34:ALA:N	1:A:34:ALA:CA	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	1	6.86
(1,58)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	5	6.24
(1,58)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	2	6.07
(1,28)	1:A:44:TRP:N	1:A:44:TRP:CA	1:A:44:TRP:C	1:A:45:PRO:N	7	5.89
(1,58)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	19	5.72
(1,110)	1:A:147:ASP:C	1:A:148:GLY:N	1:A:148:GLY:CA	1:A:148:GLY:C	7	5.69
(1,58)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	17	5.64
(1,73)	1:A:121:MET:N	1:A:121:MET:CA	1:A:121:MET:C	1:A:122:ASP:N	19	5.39
(1,18)	1:A:34:ALA:N	1:A:34:ALA:CA	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	18	5.0
(1,48)	1:A:84:ARG:N	1:A:84:ARG:CA	1:A:84:ARG:C	1:A:85:PRO:N	5	3.41
(1,4)	1:A:21:TYR:N	1:A:21:TYR:CA	1:A:21:TYR:C	1:A:22:ILE:N	12	3.38
(1,73)	1:A:121:MET:N	1:A:121:MET:CA	1:A:121:MET:C	1:A:122:ASP:N	18	3.28
(1,18)	1:A:34:ALA:N	1:A:34:ALA:CA	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	2	2.84
(1,18)	1:A:34:ALA:N	1:A:34:ALA:CA	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	7	2.39
(1,58)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	16	2.37
(1,19)	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:C	14	1.58
(1,73)	1:A:121:MET:N	1:A:121:MET:CA	1:A:121:MET:C	1:A:122:ASP:N	3	1.53
(1,73)	1:A:121:MET:N	1:A:121:MET:CA	1:A:121:MET:C	1:A:122:ASP:N	16	0.96
(1,73)	1:A:121:MET:N	1:A:121:MET:CA	1:A:121:MET:C	1:A:122:ASP:N	15	0.93
(1,57)	1:A:103:LEU:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	17	0.68
(1,13)	1:A:30:SER:C	1:A:31:HIS:N	1:A:31:HIS:CA	1:A:31:HIS:C	19	0.47
(1,111)	1:A:148:GLY:N	1:A:148:GLY:CA	1:A:148:GLY:C	1:A:149:ASP:N	13	0.45
(1,57)	1:A:103:LEU:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	3	0.43
(1,47)	1:A:83:ALA:C	1:A:84:ARG:N	1:A:84:ARG:CA	1:A:84:ARG:C	17	0.38
(1,29)	1:A:45:PRO:C	1:A:46:VAL:N	1:A:46:VAL:CA	1:A:46:VAL:C	1	0.35
(1,21)	1:A:35:PHE:C	1:A:36:ALA:N	1:A:36:ALA:CA	1:A:36:ALA:C	5	0.35
(1,48)	1:A:84:ARG:N	1:A:84:ARG:CA	1:A:84:ARG:C	1:A:85:PRO:N	20	0.33
(1,57)	1:A:103:LEU:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	16	0.32
(1,110)	1:A:147:ASP:C	1:A:148:GLY:N	1:A:148:GLY:CA	1:A:148:GLY:C	12	0.32
(1,27)	1:A:43:SER:C	1:A:44:TRP:N	1:A:44:TRP:CA	1:A:44:TRP:C	12	0.3
(1,57)	1:A:103:LEU:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	12	0.27
	•			1	Continu	ed on next page



Key	ed from previous po Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( ° )
(1,57)	1:A:103:LEU:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	14	0.27
(1,57)	1:A:103:LEU:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	8	0.25
(1,27)	1:A:43:SER:C	1:A:44:TRP:N	1:A:44:TRP:CA	1:A:44:TRP:C	17	0.25
(1,21)	1:A:35:PHE:C	1:A:36:ALA:N	1:A:36:ALA:CA	1:A:36:ALA:C	16	0.25
(1,57)	1:A:103:LEU:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	7	0.23
(1,57)	1:A:103:LEU:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	19	0.19
(1,31)	1:A:49:PRO:C	1:A:50:ALA:N	1:A:50:ALA:CA	1:A:50:ALA:C	10	0.19
(1,62)	1:A:106:GLU:C	1:A:107:GLN:N	1:A:107:GLN:CA	1:A:107:GLN:C	8	0.18
(1,57)	1:A:103:LEU:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1	0.18
(1,29)	1:A:45:PRO:C	1:A:46:VAL:N	1:A:46:VAL:CA	1:A:46:VAL:C	20	0.18
(1,106)	1:A:143:ALA:C	1:A:144:LEU:N	1:A:144:LEU:CA	1:A:144:LEU:C	18	0.18
(1,62)	1:A:106:GLU:C	1:A:107:GLN:N	1:A:107:GLN:CA	1:A:107:GLN:C	13	0.16
(1,46)	1:A:71:LEU:N	1:A:71:LEU:CA	1:A:71:LEU:C	1:A:72:ALA:N	2	0.16
(1,29)	1:A:45:PRO:C	1:A:46:VAL:N	1:A:46:VAL:CA	1:A:46:VAL:C	6	0.16
(1,25)	1:A:42:ALA:C	1:A:43:SER:N	1:A:43:SER:CA	1:A:43:SER:C	17	0.16
(1,111)	1:A:148:GLY:N	1:A:148:GLY:CA	1:A:148:GLY:C	1:A:149:ASP:N	14	0.15
(1,57)	1:A:103:LEU:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	11	0.14
(1,57)	1:A:103:LEU:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	13	0.14
(1,21)	1:A:35:PHE:C	1:A:36:ALA:N	1:A:36:ALA:CA	1:A:36:ALA:C	18	0.14
(1,10)	1:A:24:VAL:N	1:A:24:VAL:CA	1:A:24:VAL:C	1:A:25:ASN:N	3	0.13
(1,57)	1:A:103:LEU:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	2	0.12
(1,57)	1:A:103:LEU:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	6	0.12
(1,7)	1:A:22:ILE:C	1:A:23:GLU:N	1:A:23:GLU:CA	1:A:23:GLU:C	19	0.11
(1,60)	1:A:105:PRO:C	1:A:106:GLU:N	1:A:106:GLU:CA	1:A:106:GLU:C	9	0.11
(1,25)	1:A:42:ALA:C	1:A:43:SER:N	1:A:43:SER:CA	1:A:43:SER:C	12	0.1
(1,21)	1:A:35:PHE:C	1:A:36:ALA:N	1:A:36:ALA:CA	1:A:36:ALA:C	1	0.1
(1,13)	1:A:30:SER:C	1:A:31:HIS:N	1:A:31:HIS:CA	1:A:31:HIS:C	2	0.1
(1,47)	1:A:83:ALA:C	1:A:84:ARG:N	1:A:84:ARG:CA	1:A:84:ARG:C	4	0.09
(1,106)	1:A:143:ALA:C	1:A:144:LEU:N	1:A:144:LEU:CA	1:A:144:LEU:C	17	0.09
(1,57)	1:A:103:LEU:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	5	0.08
(1,27)	1:A:43:SER:C	1:A:44:TRP:N	1:A:44:TRP:CA	1:A:44:TRP:C	16	0.08
(1,21)	1:A:35:PHE:C	1:A:36:ALA:N	1:A:36:ALA:CA	1:A:36:ALA:C	11	0.08
(1,110)	1:A:147:ASP:C	1:A:148:GLY:N	1:A:148:GLY:CA	1:A:148:GLY:C	8	0.08
(1,21)	1:A:35:PHE:C	1:A:36:ALA:N	1:A:36:ALA:CA	1:A:36:ALA:C	7	0.07
(1,62)	1:A:106:GLU:C	1:A:107:GLN:N	1:A:107:GLN:CA	1:A:107:GLN:C	19	0.06
(1,47)	1:A:83:ALA:C	1:A:84:ARG:N	1:A:84:ARG:CA	1:A:84:ARG:C	12	0.06
(1,18)	1:A:34:ALA:N	1:A:34:ALA:CA	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	6	0.06
(1,62)	1:A:106:GLU:C	1:A:107:GLN:N	1:A:107:GLN:CA	1:A:107:GLN:C	7	0.05
(1,23)	1:A:40:PRO:C	1:A:41:VAL:N	1:A:41:VAL:CA	1:A:41:VAL:C	9	0.05
(1,106)	1:A:143:ALA:C	1:A:144:LEU:N	1:A:144:LEU:CA	1:A:144:LEU:C	13	0.04
(1,57)	1:A:103:LEU:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	18	0.03
(1,5)	1:A:21:TYR:C	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:C	8	0.03
(1,18)	1:A:34:ALA:N	1:A:34:ALA:CA	1:A:34:ALA:C	1:A:35:PHE:N	14	0.02
(1,47)	1:A:83:ALA:C	1:A:84:ARG:N	1:A:84:ARG:CA	1:A:84:ARG:C	9	0.01

