

wwPDB NMR Structure Validation Summary Report (i)

Jul 2, 2020 - 12:54 AM CDT

PDB ID : 2LOY

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

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

Genomics Consortium Target WR73

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

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

Structural Genomics Consortium (NESG)

Deposited on : 2012-01-27

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

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

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

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

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)

NmrClust : Kelley et al. (1996)

MolProbity: 4.02b-467

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

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

PANAV : Wang et al. (2010)

 $\begin{array}{cccc} & ShiftChecker & : & 2.6.dev1 \\ BMRB \ Restraints \ Analalysis & : & v1.2 \end{array}$

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

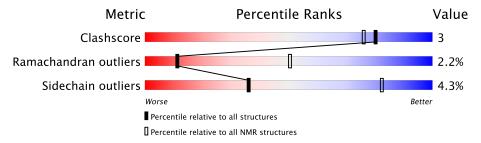
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.6.dev1

1 Overall quality at a glance (i)

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

The overall completeness of chemical shifts assignment is 43%.

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



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

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

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



2 Ensemble composition and analysis (i)

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

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

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

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

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

The models can be grouped into 4 clusters and 2 single-model clusters were found.

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



3 Entry composition (i)

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

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

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

There are 8 discrepancies between the modelled and reference sequences:

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

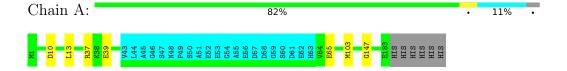


4 Residue-property plots (i)

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

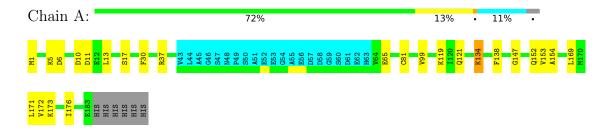
• Molecule 1: Translationally-controlled tumor protein homolog



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

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

• Molecule 1: Translationally-controlled tumor protein homolog





5 Refinement protocol and experimental data overview (i)



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

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

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

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

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

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



6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts (i)

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

| Mol | Chain | Non-H | H(model) | H(added) | Clashes |
|-----|-------|-------|----------|----------|---------|
| 1 | A | 1312 | 1329 | 1326 | 8±2 |
| All | All | 26240 | 26580 | 26520 | 154 |

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

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

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

6.3 Torsion angles (i)

6.3.1 Protein backbone (i)

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



| Mol | Chain | Analysed | Favoured | Allowed | Outliers | Perc | entiles |
|-----|-------|-----------------|---------------|-------------|------------|------|---------|
| 1 | A | 160/189 (85%) | 144±3 (90±2%) | 12±3 (8±2%) | 4±1 (2±1%) | 11 | 50 |
| All | All | 3200/3780 (85%) | 2881 (90%) | 248 (8%) | 71 (2%) | 11 | 50 |

5 of 23 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 13 | LEU | 13 |
| 1 | A | 147 | GLY | 12 |
| 1 | A | 39 | GLU | 8 |
| 1 | A | 16 | ASP | 5 |
| 1 | A | 134 | LYS | 5 |

6.3.2 Protein sidechains (i)

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

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

5 of 51 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 143 | ARG | 6 |
| 1 | A | 178 | GLU | 6 |
| 1 | A | 20 | MET | 6 |
| 1 | A | 152 | GLN | 6 |
| 1 | A | 31 | LYS | 5 |

6.3.3 RNA (i)

There are no RNA molecules in this entry.



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

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

6.5 Carbohydrates (i)

There are no carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry (i)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers (i)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues (i)

There are no chain breaks in this entry.



7 Chemical shift validation (i)

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

7.1 Chemical shift list 1

File name: 2loy nmr.cif

Chemical shift list name: nef_chemical_shift_list_2loy.mr

7.1.1 Bookkeeping (i)

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

| Total number of shifts | 1267 |
|---|------|
| Number of shifts mapped to atoms | 996 |
| Number of unparsed shifts | 147 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 124 |
| Number of shift outliers (ShiftChecker) | 1 |

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

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

| Shift ID | Chain | Chain Res Type Atom | | | Shift Dat | a | |
|----------|-------|---------------------|------|------|-----------|-------------|-----------|
| | Chain | rtes | Type | Atom | Value | Uncertainty | Ambiguity |
| 6 | A | 2 | LEU | HD1% | 0.691 | 0.000 | 1 |
| 7 | A | 2 | LEU | HD1% | 0.691 | 0.000 | 1 |
| 9 | A | 2 | LEU | HD2% | 0.566 | 0.000 | 1 |
| 10 | A | 2 | LEU | HD2% | 0.566 | 0.000 | 1 |
| 19 | A | 3 | ILE | HD1% | 0.767 | 0.000 | 1 |

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

• No matching atoms found in structure. First 5 (of 124) occurrences are reported below.

| | Chain | Dog | Type | Atom | | Shift Dat | a |
|---|-------|-----|------|------|-------|--------------------------|-----------|
| | Chain | nes | Type | Atom | Value | Shift Dat Uncertainty | Ambiguity |
| ĺ | A | 88 | PHE | HBy | 3.097 | 0.0 | 2 |
| | A | 73 | ASN | HD2x | 7.119 | 0.0 | 2 |



Continued from previous page...

| Chain Res Type | | Atom | Shift Data | | | |
|----------------|-----|------|------------|-------|-------------|-----------|
| Chain | nes | Туре | Atom | Value | Uncertainty | Ambiguity |
| A | 95 | PHE | HBy | 2.538 | 0.0 | 2 |
| A | 44 | LEU | HD1% | 0.923 | 0.0 | 1 |
| A | 106 | ASN | HD2x | 6.967 | 0.0 | 2 |

7.1.2 Chemical shift referencing (i)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

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

7.1.3 Completeness of resonance assignments (i)

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

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

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts (i)

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

| Mol | Chain | Res | Type | Atom | Shift, ppm | Expected range, ppm | Z-score |
|-----|-------|-----|------|------|------------|---------------------|---------|
| 1 | A | 143 | ARG | Н | 11.73 | 11.29 - 5.19 | 5.7 |

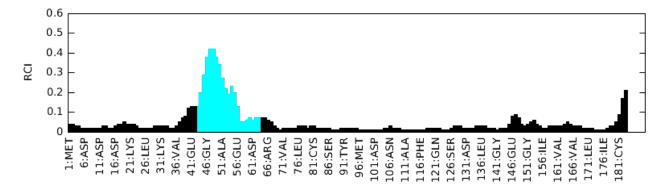
7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots (i)

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



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

Random coil index (RCI) for chain A:





8 NMR restraints analysis

8.1 Conformationally restricting restraints

The following table provides the summary of experimentally observed NMR restraints in different categories. Restraints are classified into different categories based on the sequence separation of the atoms involved.

| Description | Value |
|---|-------|
| Total distance restraints | 1100 |
| Intra-residue ($ i-j =0$) | 95 |
| Sequential (i-j =1) | 282 |
| Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$) | 311 |
| Long range (i-j ≥5) | 412 |
| Inter-chain | 0 |
| Total dihedral-angle restraints | 293 |
| Total hydrogen bond restraints | 252 |
| Total disulfide bond restraints | 0 |
| Number of unmapped restraints | 0 |
| Number of restraints per residue | 6.1 |
| Number of long range restraints per residue | 2.3 |

8.2 Residual restraint violations

This section provides the overview of the restraint violations analysis. The violations are binned as small, medium and large violations based on its absolute value. Average number of violations per model is calculated by dividing the total number of violations in each bin by the size of the ensemble.

8.2.1 Average number of distance violations per model

Distance violations less than 0.1 Å are not included in the calculation.

| Bins (Å) | Average number of violations per model | Max (Å) |
|------------------|--|---------|
| 0.1-0.2 (Small) | 6.5 | 0.2 |
| 0.2-0.5 (Medium) | 1.1 | 0.33 |
| >0.5 (Large) | None | None |

8.2.2 Average number of dihedral-angle violations per model

Dihedral-angle violations less than 1° are not included in the calculation.



| Bins $(^{\circ})$ | Average number of violations per model | $\mathrm{Max}\;(^\circ)$ |
|--------------------|--|--------------------------|
| 1.0-10.0 (Small) | 21.9 | 9.7 |
| 10.0-20.0 (Medium) | 0.1 | 11.6 |
| >20.0 (Large) | 0.9 | 150.5 |



9 Distance violation analysis

9.1 Summary of distance violations

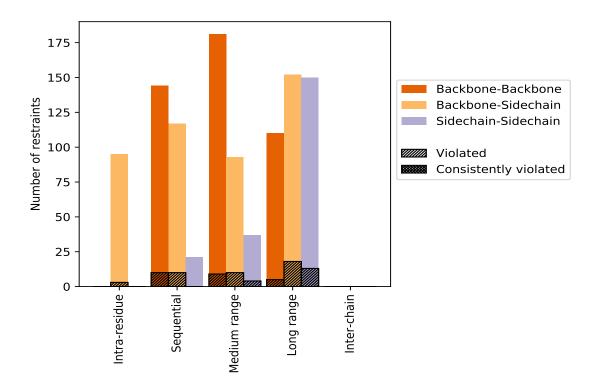
The following table shows the summary of distance violations in different restraint categories based on the sequence separation of the atoms involved. Each category is further sub-divided into three sub-categories based on the atoms involved. Violations less than 0.1 Å are not included in the statistics.

| Doctroints type | Count | % ¹ | Vic | lated ⁵ | 3 | Consis | tentl | $\overline{{ m y~Violated}^4}$ |
|---------------------------------------|-------|-----------------------|-------|--------------------|---------|--------|----------|--------------------------------|
| Restraints type | Count | 70- | Count | $\%^2$ | $1\%^1$ | Count | $ \%^2 $ | $\%^1$ |
| Intra-residue (i-j =0) | 95 | 8.6 | 3 | 3.2 | 0.3 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Backbone | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 95 | 8.6 | 3 | 3.2 | 0.3 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sidechain-Sidechain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sequential (i-j =1) | 282 | 25.6 | 20 | 7.1 | 1.8 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Backbone | 144 | 13.1 | 10 | 6.9 | 0.9 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 117 | 10.6 | 10 | 8.5 | 0.9 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sidechain-Sidechain | 21 | 1.9 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Medium range ($ i-j >1 \& i-j <5$) | 311 | 28.3 | 23 | 7.4 | 2.1 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Backbone | 181 | 16.5 | 9 | 5.0 | 0.8 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 93 | 8.5 | 10 | 10.8 | 0.9 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sidechain-Sidechain | 37 | 3.4 | 4 | 10.8 | 0.4 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Long range ($ i-j \ge 5$) | 412 | 37.5 | 36 | 8.7 | 3.3 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Backbone | 110 | 10.0 | 5 | 4.5 | 0.5 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 152 | 13.8 | 18 | 11.8 | 1.6 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sidechain-Sidechain | 150 | 13.6 | 13 | 8.7 | 1.2 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Inter-chain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Backbone | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sidechain-Sidechain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Total | 1100 | 100.0 | 82 | 7.5 | 7.5 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Backbone | 435 | 39.5 | 24 | 5.5 | 2.2 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 457 | 41.5 | 41 | 9.0 | 3.7 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sidechain-Sidechain | 208 | 18.9 | 17 | 8.2 | 1.5 | 0 | 0.0 | 0.0 |

 $^{^1}$ percentage calculated with respect to the total number of distance restraints, 2 percentage calculated with respect to the number of restraints in a particular restraint category, 3 violated in at least one model, 4 violated in all the models



9.1.1 Bar chart: Distribution of distance restraints and violations



Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

9.2 Distance violation statistics for each model

The following table provides the distance violation statistics for each model in the ensemble. Violations less than 0.1 Å are not included in the statistics.

| Mar dal ID | | Nun | nber o | f viola | ations | 3 | N/L (&) | Μ (Å) | SD6 (Å) |
|------------|-----------|--------|--------|---------|--------|-------|-----------|---------|---------------------|
| Model ID | $ m IR^1$ | SQ^2 | MR^3 | LR^4 | IC^5 | Total | Mean (Å) | Max (Å) | \mathbf{SD}^6 (Å) |
| 1 | 0 | 1 | 2 | 0 | 0 | 3 | 0.17 | 0.25 | 0.06 |
| 2 | 1 | 3 | 5 | 1 | 0 | 10 | 0.16 | 0.25 | 0.04 |
| 3 | 1 | 2 | 4 | 3 | 0 | 10 | 0.15 | 0.25 | 0.04 |
| 4 | 1 | 4 | 1 | 1 | 0 | 7 | 0.15 | 0.27 | 0.05 |
| 5 | 0 | 1 | 1 | 3 | 0 | 5 | 0.11 | 0.12 | 0.0 |
| 6 | 0 | 3 | 1 | 1 | 0 | 5 | 0.17 | 0.21 | 0.02 |
| 7 | 0 | 2 | 2 | 7 | 0 | 11 | 0.13 | 0.17 | 0.02 |
| 8 | 0 | 2 | 2 | 2 | 0 | 6 | 0.14 | 0.17 | 0.02 |
| 9 | 1 | 1 | 2 | 7 | 0 | 11 | 0.14 | 0.25 | 0.04 |
| 10 | 0 | 1 | 4 | 5 | 0 | 10 | 0.18 | 0.33 | 0.06 |
| 11 | 0 | 1 | 2 | 3 | 0 | 6 | 0.17 | 0.27 | 0.05 |
| 12 | 1 | 1 | 4 | 1 | 0 | 7 | 0.16 | 0.26 | 0.05 |

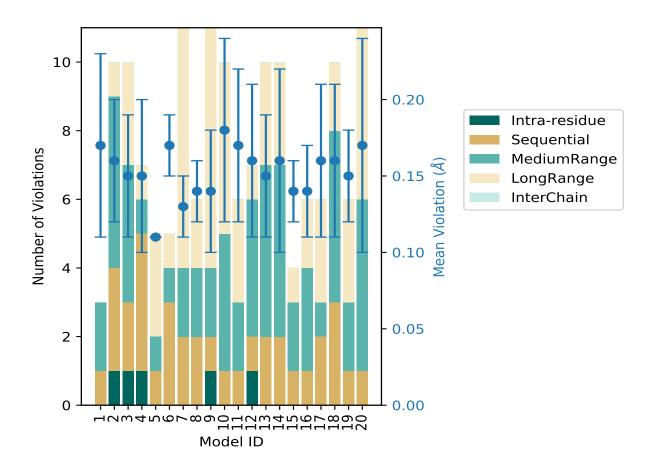


Continued from previous page...

| Model ID | | Nun | nber o | f viola | tions | 1 | Mean (Å) | Mean (Å) Max (Å) | |
|----------|--------|--------|-----------|---------|--------|-------|----------|------------------|---|
| Model 1D | IR^1 | SQ^2 | $ m MR^3$ | LR^4 | IC^5 | Total | Mean (A) | Max (A) | $ig \mathbf{SD}^6 \ (\mathbf{\mathring{A}}) \ ig $ |
| 13 | 0 | 2 | 5 | 3 | 0 | 10 | 0.15 | 0.21 | 0.04 |
| 14 | 0 | 2 | 5 | 3 | 0 | 10 | 0.16 | 0.32 | 0.06 |
| 15 | 0 | 1 | 2 | 1 | 0 | 4 | 0.14 | 0.16 | 0.02 |
| 16 | 0 | 1 | 3 | 2 | 0 | 6 | 0.14 | 0.21 | 0.03 |
| 17 | 0 | 2 | 1 | 3 | 0 | 6 | 0.16 | 0.25 | 0.05 |
| 18 | 0 | 3 | 5 | 2 | 0 | 10 | 0.16 | 0.26 | 0.05 |
| 19 | 0 | 1 | 2 | 3 | 0 | 6 | 0.15 | 0.21 | 0.03 |
| 20 | 0 | 1 | 5 | 5 | 0 | 11 | 0.17 | 0.31 | 0.07 |

 $^{^1}$ Intra-residue restraints, 2 Sequential restraints, 3 Medium range restraints, 4 Long range restraints, 5 Inter-chain restraints, 6 Standard deviation

9.2.1 Bar graph: Distance Violation statistics for each model



The mean and the standard deviation are shown in blue with respect to the y axis on the right



9.3 Distance violation statistics for the ensemble

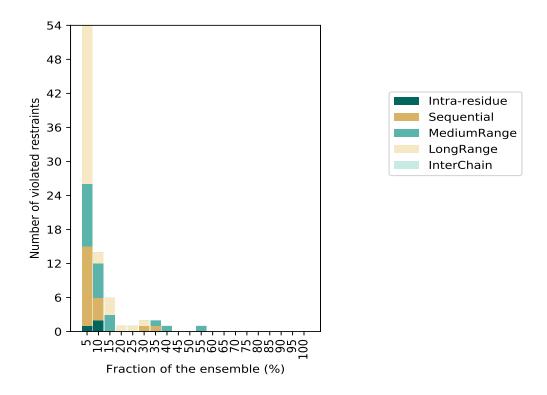
Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 1018(IR:92, SQ:262, MR:288, LR:376, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

| Nu | $\overline{\mathbf{mber}}$ | of vio | lated | restra | aints | Fraction | n of the ensemble |
|--------|----------------------------|--------|--------|--------|-------|--------------------|-------------------|
| IR^1 | SQ^2 | MR^3 | LR^4 | IC^5 | Total | Count ⁶ | % |
| 1 | 14 | 11 | 28 | 0 | 54 | 1 | 5.0 |
| 2 | 4 | 6 | 2 | 0 | 14 | 2 | 10.0 |
| 0 | 0 | 3 | 3 | 0 | 6 | 3 | 15.0 |
| 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 1 | 4 | 20.0 |
| 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 1 | 5 | 25.0 |
| 0 | 1 | 0 | 1 | 0 | 2 | 6 | 30.0 |
| 0 | 1 | 1 | 0 | 0 | 2 | 7 | 35.0 |
| 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 | 8 | 40.0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 9 | 45.0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 10 | 50.0 |
| 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 | 11 | 55.0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 12 | 60.0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 13 | 65.0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 14 | 70.0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 15 | 75.0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 16 | 80.0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 17 | 85.0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 18 | 90.0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 19 | 95.0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 20 | 100.0 |

 $^{^1}$ Intra-residue restraints, 2 Sequential restraints, 3 Medium range restraints, 4 Long range restraints, 5 Inter-chain restraints, 6 Number of models with violations



9.3.1 Bar graph: Distance violation statistics for the ensemble

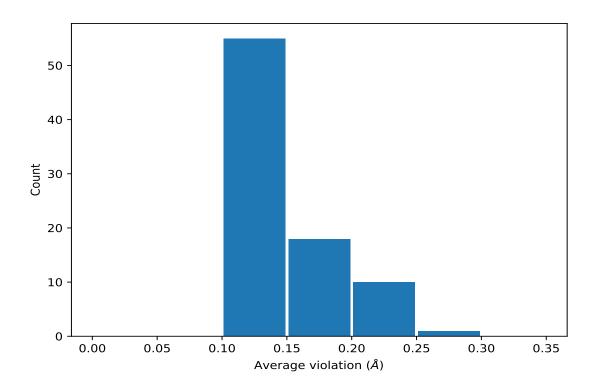


9.4 Most violated distance restraints in the ensemble

9.4.1 Histogram: Distribution of mean distance violations

The following histogram shows the distribution of the average value of the violation. The average is calculated for each restraint that is violated in more than one model over all the violated models in the ensemble





9.4.2 Table: Most violated distance restraints

The following table provides the mean and the standard deviation of the absolute value of the violation for each restraint sorted by number of violated models and the mean value. The Key (restraint list ID, restraint ID) is the unique identifier for a given restraint. Rows with same key represent combinatorial or ambiguous restraints and are counted as a single restraint.

| Key | Atom-1 | Atom-2 | \mathbf{Models}^1 | Mean (Å) | \mathbf{SD}^1 (Å) |
|---------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|
| (1,455) | 1:A:8:PHE:H | 1:A:11:ASP:H | 11 | 0.24 | 0.04 |
| (1,874) | 1:A:64:VAL:HG21 | 1:A:66:ARG:H | 8 | 0.17 | 0.06 |
| (1,874) | 1:A:64:VAL:HG22 | 1:A:66:ARG:H | 8 | 0.17 | 0.06 |
| (1,874) | 1:A:64:VAL:HG23 | 1:A:66:ARG:H | 8 | 0.17 | 0.06 |
| (1,93) | 1:A:39:GLU:H | 1:A:40:GLY:H | 7 | 0.14 | 0.02 |
| (1,391) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:H | 7 | 0.14 | 0.02 |
| (1,391) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:H | 7 | 0.14 | 0.02 |
| (1,391) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:H | 7 | 0.14 | 0.02 |
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG11 | 6 | 0.19 | 0.07 |
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG12 | 6 | 0.19 | 0.07 |
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG13 | 6 | 0.19 | 0.07 |
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG21 | 6 | 0.19 | 0.07 |
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG22 | 6 | 0.19 | 0.07 |
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG23 | 6 | 0.19 | 0.07 |
| (1,79) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:14:SER:H | 6 | 0.17 | 0.05 |
| (1,860) | 1:A:139:PHE:H | 1:A:153:VAL:HG21 | 5 | 0.13 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | \mathbf{Models}^1 | Mean (Å) | \mathbf{SD}^1 (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|
| (1,860) | 1:A:139:PHE:H | 1:A:153:VAL:HG22 | 5 | 0.13 | 0.01 |
| (1,860) | 1:A:139:PHE:H | 1:A:153:VAL:HG23 | 5 | 0.13 | 0.01 |
| (1,1009) | 1:A:155:ILE:H | 1:A:170:MET:O | 4 | 0.13 | 0.01 |
| (1,862) | 1:A:62:GLU:H | 1:A:64:VAL:HG21 | 3 | 0.13 | 0.01 |
| (1,862) | 1:A:62:GLU:H | 1:A:64:VAL:HG22 | 3 | 0.13 | 0.01 |
| (1,862) | 1:A:62:GLU:H | 1:A:64:VAL:HG23 | 3 | 0.13 | 0.01 |
| (1,751) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:44:LEU:HD21 | 3 | 0.2 | 0.04 |
| (1,751) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:44:LEU:HD22 | 3 | 0.2 | 0.04 |
| (1,751) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:44:LEU:HD23 | 3 | 0.2 | 0.04 |
| (1,751) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:44:LEU:HD21 | 3 | 0.2 | 0.04 |
| (1,751) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:44:LEU:HD22 | 3 | 0.2 | 0.04 |
| (1,751) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:44:LEU:HD23 | 3 | 0.2 | 0.04 |
| (1,751) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:44:LEU:HD21 | 3 | 0.2 | 0.04 |
| (1,751) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:44:LEU:HD22 | 3 | 0.2 | 0.04 |
| (1,751) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:44:LEU:HD23 | 3 | 0.2 | 0.04 |
| (1,663) | 1:A:149:GLU:H | 1:A:151:GLY:H | 3 | 0.11 | 0.0 |
| (1,540) | 1:A:133:PHE:HD1 | 1:A:136:LEU:HD21 | 3 | 0.12 | 0.0 |
| (1,540) | 1:A:133:PHE:HD1 | 1:A:136:LEU:HD22 | 3 | 0.12 | 0.0 |
| (1,540) | 1:A:133:PHE:HD1 | 1:A:136:LEU:HD23 | 3 | 0.12 | 0.0 |
| (1,540) | 1:A:133:PHE:HD2 | 1:A:136:LEU:HD21 | 3 | 0.12 | 0.0 |
| (1,540) | 1:A:133:PHE:HD2 | 1:A:136:LEU:HD22 | 3 | 0.12 | 0.0 |
| (1,540) | 1:A:133:PHE:HD2 | 1:A:136:LEU:HD23 | 3 | 0.12 | 0.0 |
| (1,500) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:153:VAL:HG21 | 3 | 0.12 | 0.0 |
| (1,500) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:153:VAL:HG22 | 3 | 0.12 | 0.0 |
| (1,500) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:153:VAL:HG23 | 3 | 0.12 | 0.0 |
| (1,500) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:153:VAL:HG21 | 3 | 0.12 | 0.0 |
| (1,500) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:153:VAL:HG22 | 3 | 0.12 | 0.0 |
| (1,500) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:153:VAL:HG23 | 3 | 0.12 | 0.0 |
| (1,241) | 1:A:37:ARG:H | 1:A:66:ARG:H | 3 | 0.16 | 0.04 |
| (1,942) | 1:A:135:ASN:HD21 | 1:A:136:LEU:H | 2 | 0.15 | 0.0 |
| (1,942) | 1:A:135:ASN:HD22 | 1:A:136:LEU:H | 2 | 0.15 | 0.0 |
| (1,829) | 1:A:124:VAL:HG11 | 1:A:128:LEU:H | 2 | 0.12 | 0.0 |
| (1,829) | 1:A:124:VAL:HG12 | 1:A:128:LEU:H | 2 | 0.12 | 0.0 |
| (1,829) | 1:A:124:VAL:HG13 | 1:A:128:LEU:H | 2 | 0.12 | 0.0 |
| (1,648) | 1:A:56:GLU:H | 1:A:57:ASP:H | 2 | 0.11 | 0.0 |
| (1,609) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:82:TYR:H | 2 | 0.12 | 0.01 |
| (1,553) | 1:A:124:VAL:HG11 | 1:A:128:LEU:HD21 | 2 | 0.11 | 0.0 |
| (1,553) | 1:A:124:VAL:HG11 | 1:A:128:LEU:HD22 | 2 | 0.11 | 0.0 |
| (1,553) | 1:A:124:VAL:HG11 | 1:A:128:LEU:HD23 | 2 | 0.11 | 0.0 |
| (1,553) | 1:A:124:VAL:HG12 | 1:A:128:LEU:HD21 | 2 | 0.11 | 0.0 |
| (1,553) | 1:A:124:VAL:HG12 | 1:A:128:LEU:HD22 | 2 | 0.11 | 0.0 |
| (1,553) | 1:A:124:VAL:HG12 | 1:A:128:LEU:HD23 | 2 | 0.11 | 0.0 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | \mathbf{Models}^1 | Mean (Å) | \mathbf{SD}^1 (Å) |
|---------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|
| (1,553) | 1:A:124:VAL:HG13 | 1:A:128:LEU:HD21 | 2 | 0.11 | 0.0 |
| (1,553) | 1:A:124:VAL:HG13 | 1:A:128:LEU:HD22 | 2 | 0.11 | 0.0 |
| (1,553) | 1:A:124:VAL:HG13 | 1:A:128:LEU:HD23 | 2 | 0.11 | 0.0 |
| (1,517) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HD1 | 2 | 0.13 | 0.0 |
| (1,517) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HD2 | 2 | 0.13 | 0.0 |
| (1,517) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HD1 | 2 | 0.13 | 0.0 |
| (1,517) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HD2 | 2 | 0.13 | 0.0 |
| (1,517) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HD1 | 2 | 0.13 | 0.0 |
| (1,517) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HD2 | 2 | 0.13 | 0.0 |
| (1,50) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:80:ASN:HD22 | 2 | 0.27 | 0.01 |
| (1,415) | 1:A:131:ASP:H | 1:A:134:LYS:H | 2 | 0.19 | 0.02 |
| (1,341) | 1:A:95:PHE:HD1 | 1:A:98:ASN:H | 2 | 0.12 | 0.0 |
| (1,341) | 1:A:95:PHE:HD2 | 1:A:98:ASN:H | 2 | 0.12 | 0.0 |
| (1,291) | 1:A:182:LEU:HD21 | 1:A:183:GLU:H | 2 | 0.12 | 0.01 |
| (1,291) | 1:A:182:LEU:HD22 | 1:A:183:GLU:H | 2 | 0.12 | 0.01 |
| (1,291) | 1:A:182:LEU:HD23 | 1:A:183:GLU:H | 2 | 0.12 | 0.01 |
| (1,265) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:72:LEU:HD11 | 2 | 0.11 | 0.0 |
| (1,265) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:72:LEU:HD12 | 2 | 0.11 | 0.0 |
| (1,265) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:72:LEU:HD13 | 2 | 0.11 | 0.0 |
| (1,243) | 1:A:66:ARG:H | 1:A:72:LEU:HD21 | 2 | 0.18 | 0.01 |
| (1,243) | 1:A:66:ARG:H | 1:A:72:LEU:HD22 | 2 | 0.18 | 0.01 |
| (1,243) | 1:A:66:ARG:H | 1:A:72:LEU:HD23 | 2 | 0.18 | 0.01 |
| (1,160) | 1:A:44:LEU:H | 1:A:44:LEU:HD11 | 2 | 0.14 | 0.03 |
| (1,160) | 1:A:44:LEU:H | 1:A:44:LEU:HD12 | 2 | 0.14 | 0.03 |
| (1,160) | 1:A:44:LEU:H | 1:A:44:LEU:HD13 | 2 | 0.14 | 0.03 |
| (1,100) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:59:GLY:H | 2 | 0.16 | 0.04 |

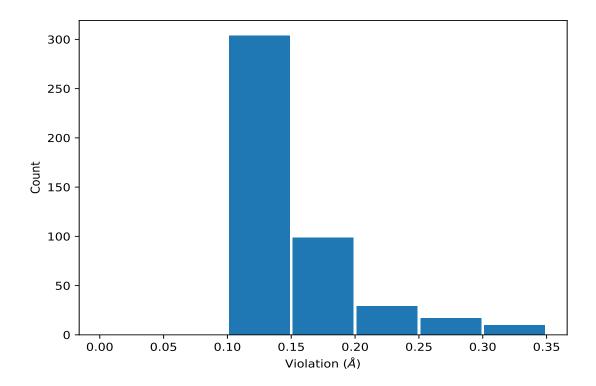
¹Number of violated models, ²Standard deviation

9.5 All distance violations

9.5.1 Histogram : Distribution of distance violations

The following histogram shows the distribution of the absolute value of the violation for all violated restraints in the ensemble.





9.5.2 Table: All distance violations

The following table lists the absolute value of the violation for each restraint in the ensemble sorted by its value. The Key (restraint list ID, restraint ID) is the unique identifier for a given restraint. Rows with same key represent combinatorial or ambiguous restraints and are counted as a single restraint.

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG11 | 10 | 0.33 |
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG12 | 10 | 0.33 |
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG13 | 10 | 0.33 |
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG21 | 10 | 0.33 |
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG22 | 10 | 0.33 |
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG23 | 10 | 0.33 |
| (1,455) | 1:A:8:PHE:H | 1:A:11:ASP:H | 14 | 0.32 |
| (1,874) | 1:A:64:VAL:HG21 | 1:A:66:ARG:H | 20 | 0.31 |
| (1,874) | 1:A:64:VAL:HG22 | 1:A:66:ARG:H | 20 | 0.31 |
| (1,874) | 1:A:64:VAL:HG23 | 1:A:66:ARG:H | 20 | 0.31 |
| (1,50) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:80:ASN:HD22 | 4 | 0.27 |
| (1,455) | 1:A:8:PHE:H | 1:A:11:ASP:H | 11 | 0.27 |
| (1,79) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:14:SER:H | 18 | 0.26 |
| (1,50) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:80:ASN:HD22 | 12 | 0.26 |
| (1,751) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:44:LEU:HD21 | 9 | 0.25 |
| (1,751) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:44:LEU:HD22 | 9 | 0.25 |



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

| (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD23 9 0.25 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD21 9 0.25 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 9 0.25 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 9 0.25 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD22 9 0.25 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 9 0.25 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 9 0.25 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:1:ASP:H 1 0.25 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:1:ASP:H 2 0.25 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:1:ASP:H 2 0.25 (1,455) 1:A:3:60:ASP:H 1:A:15:GIST:H 17 0.25 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:16:ASP:H 1 0.25 (1,455) 1:A:16:ASP:H 1:A:16:CIST:H 17 0.25 (1,950) 1:A:16:ASP:H 1:A:16:CIST:H 17 | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 9 0.25 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 9 0.25 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD21 9 0.25 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD22 9 0.25 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 9 0.25 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 9 0.25 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 1 0.25 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 2 0.25 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:15:CLY:H 17 0.25 (1,455) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 | (1,751) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:44:LEU:HD23 | 9 | 0.25 |
| (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 9 0.25 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD21 9 0.25 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD22 9 0.25 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 9 0.25 (1,455) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:41:ASP:H 1 0.25 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 2 0.25 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 3 0.25 (1,455) 1:A:16:O:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 20 0.23 (1,455) 1:A:3:PHE:H 1:A:11:ASP:H | (1,751) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:44:LEU:HD21 | 9 | 0.25 |
| (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD21 9 0.25 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD22 9 0.25 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 9 0.25 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 1 0.25 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 2 0.25 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 3 0.25 (1,455) 1:A:160:ASP:H 1:A:15:GLY:H 17 0.25 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 | (1,751) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:44:LEU:HD22 | 9 | 0.25 |
| (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD22 9 0.25 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 9 0.25 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 1 0.25 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 2 0.25 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 3 0.25 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 3 0.25 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 3 0.25 (1,410) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:160:VAL:HG23 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:160:VAL:HG23 20 <td>(1,751)</td> <td>1:A:36:VAL:HG12</td> <td>1:A:44:LEU:HD23</td> <td>9</td> <td>0.25</td> | (1,751) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:44:LEU:HD23 | 9 | 0.25 |
| (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 9 0.25 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 1 0.25 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 2 0.25 (1,455) 1:A:A:PHE:H 1:A:11:ASP:H 3 0.25 (1,101) 1:A:150:ASN:H 1:A:161:GY:H 17 0.25 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 20 0.23 (1,455) 1:A:3:PHE:H 1:A:11:ASP:H 10 0.23 (1,455) 1:A:3:PHE:H 1:A:11:ASP:H 20 0.23 (1,322) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:LEU:H 20 | (1,751) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:44:LEU:HD21 | 9 | 0.25 |
| (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 1 0.25 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 2 0.25 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 3 0.25 (1,455) 1:A:16:ASP:H 1:A:15:GLY:H 17 0.25 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 20 0.23 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 10 0.23 (1,455) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:H 20 </td <td>(1,751)</td> <td>1:A:36:VAL:HG13</td> <td>1:A:44:LEU:HD22</td> <td>9</td> <td>0.25</td> | (1,751) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:44:LEU:HD22 | 9 | 0.25 |
| (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 2 0.25 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 3 0.25 (1,101) 1:A:15:0:ASN:H 1:A:151:GLY:H 17 0.25 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 20 0.23 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 10 0.23 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:171:LEU:H 20 0.23 (1,322) 1:A:28:TYR:HD2 1:A:171:LEU:H <th< td=""><td>(1,751)</td><td>1:A:36:VAL:HG13</td><td>1:A:44:LEU:HD23</td><td>9</td><td>0.25</td></th<> | (1,751) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:44:LEU:HD23 | 9 | 0.25 |
| (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 3 0.25 (1,101) 1:A:150:ASN:H 1:A:151:GLY:H 17 0.25 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 20 0.23 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:166:VAL:HG23 20 0.23 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:171:LEU:H 20 0.23 (1,322) 1:A:28:TYR:HD2 1:A:171:LEU:H 20 0.23 (1,322) 1:A:36:VAL:HG1 1:A:14:SER:H | (1,455) | 1:A:8:PHE:H | 1:A:11:ASP:H | 1 | 0.25 |
| (1,101) 1:A:150:ASN:H 1:A:151:GLY:H 17 0.25 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 20 0.23 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 10 0.23 (1,455) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:LEU:H 20 0.23 (1,322) 1:A:28:TYR:HD2 1:A:17:LEU:H 20 0.23 (1,322) 1:A:28:TYR:HD2 1:A:17:LEU:H 20 0.23 (1,751) 1:A:36:VAL:HG21 1:A:46:AG:ARG:H | (1,455) | 1:A:8:PHE:H | 1:A:11:ASP:H | 2 | 0.25 |
| (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 20 0.23 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 10 0.23 (1,455) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:H 20 0.23 (1,322) 1:A:28:TYR:HD2 1:A:11:ASP:H 20 0.23 (1,79) 1:A:13:LEU:H 1:A:14:SER:H 10 0.22 (1,455) 1:A:36:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H | (1,455) | 1:A:8:PHE:H | 1:A:11:ASP:H | 3 | 0.25 |
| (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 20 0.23 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 10 0.23 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:17:LEU:H 20 0.23 (1,322) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:LEU:H 20 0.23 (1,322) 1:A:28:TYR:HD2 1:A:17:LEU:H 20 0.23 (1,79) 1:A:13:LEU:H 1:A:14:SER:H 10 0.22 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 18 0.22 (1,454) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,79) 1:A:13:LEU:H 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 13 | (1,101) | 1:A:150:ASN:H | 1:A:151:GLY:H | 17 | 0.25 |
| (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 20 0.23 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 10 0.23 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:17:LEU:H 20 0.23 (1,322) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:LEU:H 20 0.23 (1,322) 1:A:28:TYR:HD2 1:A:17:LEU:H 20 0.23 (1,79) 1:A:13:LEU:H 1:A:17:LEU:H 20 0.23 (1,79) 1:A:13:LEU:H 1:A:66:ARG:H 18 0.22 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD22 19 | (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG11 | 20 | 0.23 |
| (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 20 0.23 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 10 0.23 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:171:LEU:H 20 0.23 (1,322) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:H 20 0.23 (1,322) 1:A:28:TYR:HD2 1:A:171:LEU:H 20 0.23 (1,79) 1:A:13:LEU:H 1:A:14:SER:H 10 0.22 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 18 0.22 (1,79) 1:A:13:LEU:H 10 0.22 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 18 0.22 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,751) 1:A:64:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 | (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG12 | 20 | 0.23 |
| (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 20 0.23 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 20 0.23 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 10 0.23 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 20 0.23 (1,322) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:H 20 0.23 (1,322) 1:A:28:TYR:HD2 1:A:171:LEU:H 20 0.23 (1,79) 1:A:13:LEU:H 1:A:14:SER:H 10 0.22 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 18 0.22 (1,79) 1:A:13:LEU:H 1:A:11:ASP:H 18 0.22 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 18 0.22 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,751) 1:A:64:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD22 19 | (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG13 | 20 | 0.23 |
| (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 20 0.23 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 10 0.23 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 20 0.23 (1,322) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:LEU:H 20 0.23 (1,79) 1:A:28:TYR:HD2 1:A:17:LEU:H 20 0.23 (1,79) 1:A:13:LEU:H 1:A:14:SER:H 10 0.22 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 18 0.22 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 19< | (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG21 | 20 | 0.23 |
| (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 10 0.23 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 20 0.23 (1,322) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:H 20 0.23 (1,79) 1:A:13:LEU:H 1:A:11:ASP:H 10 0.22 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 18 0.22 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD22 <td< td=""><td>(1,950)</td><td>1:A:160:ASP:H</td><td>1:A:166:VAL:HG22</td><td>20</td><td>0.23</td></td<> | (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG22 | 20 | 0.23 |
| (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 20 0.23 (1,322) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:H 20 0.23 (1,322) 1:A:28:TYR:HD2 1:A:171:LEU:H 20 0.23 (1,79) 1:A:13:LEU:H 1:A:14:SER:H 10 0.22 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 18 0.22 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD22 | (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG23 | 20 | 0.23 |
| (1,322) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:H 20 0.23 (1,322) 1:A:28:TYR:HD2 1:A:171:LEU:H 20 0.23 (1,79) 1:A:13:LEU:H 1:A:14:SER:H 10 0.22 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 18 0.22 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 <td>(1,455)</td> <td>1:A:8:PHE:H</td> <td>1:A:11:ASP:H</td> <td>10</td> <td>0.23</td> | (1,455) | 1:A:8:PHE:H | 1:A:11:ASP:H | 10 | 0.23 |
| (1,322) 1:A:28:TYR:HD2 1:A:171:LEU:H 20 0.23 (1,79) 1:A:13:LEU:H 1:A:14:SER:H 10 0.22 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 18 0.22 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:46:CEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 | (1,455) | 1:A:8:PHE:H | 1:A:11:ASP:H | 20 | 0.23 |
| (1,79) 1:A:13:LEU:H 1:A:14:SER:H 10 0.22 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 18 0.22 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:H | (1,322) | 1:A:28:TYR:HD1 | 1:A:171:LEU:H | 20 | 0.23 |
| (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 18 0.22 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,874) 1:A:66:VAL:HG11 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:L | (1,322) | 1:A:28:TYR:HD2 | 1:A:171:LEU:H | 20 | 0.23 |
| (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1 | (1,79) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:14:SER:H | 10 | 0.22 |
| (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 | (1,455) | 1:A:8:PHE:H | 1:A:11:ASP:H | 18 | 0.22 |
| (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 13 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 16 0.21 (1,455) 1:A:58:ASP:H 1: | (1,874) | 1:A:64:VAL:HG21 | 1:A:66:ARG:H | 13 | 0.21 |
| (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 16 0.21 (1,455) 1:A:43:1:ASP:H 1:A:13:ASP:H 6 0.21 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 12 0.2 | (1,874) | 1:A:64:VAL:HG22 | 1:A:66:ARG:H | 13 | 0.21 |
| (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 16 0.21 (1,415) 1:A:131:ASP:H 1:A:134:LYS:H 3 0.21 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:59:GLY:H 6 0.21 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 12 0.2 | (1,874) | 1:A:64:VAL:HG23 | 1:A:66:ARG:H | 13 | 0.21 |
| (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 16 0.21 (1,415) 1:A:131:ASP:H 1:A:134:LYS:H 3 0.21 (1,400) 1:A:58:ASP:H 1:A:59:GLY:H 6 0.21 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 12 0.2 | (1,751) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:44:LEU:HD21 | 19 | 0.21 |
| (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 16 0.21 (1,415) 1:A:131:ASP:H 1:A:134:LYS:H 3 0.21 (1,100) 1:A:58:ASP:H 1:A:59:GLY:H 6 0.21 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 12 0.2 | (1,751) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:44:LEU:HD22 | 19 | 0.21 |
| (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 16 0.21 (1,415) 1:A:131:ASP:H 1:A:134:LYS:H 3 0.21 (1,100) 1:A:58:ASP:H 1:A:59:GLY:H 6 0.21 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 12 0.2 | (1,751) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:44:LEU:HD23 | 19 | 0.21 |
| (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 16 0.21 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:134:LYS:H 3 0.21 (1,100) 1:A:58:ASP:H 1:A:59:GLY:H 6 0.21 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 12 0.2 | (1,751) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:44:LEU:HD21 | 19 | 0.21 |
| (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,751) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 16 0.21 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:134:LYS:H 3 0.21 (1,400) 1:A:58:ASP:H 1:A:59:GLY:H 6 0.21 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 12 0.2 | · / | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:44:LEU:HD22 | 19 | 0.21 |
| (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD21 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 16 0.21 (1,415) 1:A:131:ASP:H 1:A:134:LYS:H 3 0.21 (1,100) 1:A:58:ASP:H 1:A:59:GLY:H 6 0.21 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 12 0.2 | · · / | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:44:LEU:HD23 | 19 | 0.21 |
| (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD22 19 0.21 (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 16 0.21 (1,415) 1:A:131:ASP:H 1:A:134:LYS:H 3 0.21 (1,100) 1:A:58:ASP:H 1:A:59:GLY:H 6 0.21 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 12 0.2 | · · / | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:44:LEU:HD21 | 19 | 0.21 |
| (1,751) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:44:LEU:HD23 19 0.21 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 16 0.21 (1,415) 1:A:131:ASP:H 1:A:134:LYS:H 3 0.21 (1,100) 1:A:58:ASP:H 1:A:59:GLY:H 6 0.21 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 12 0.2 | · · / | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:44:LEU:HD22 | 19 | 0.21 |
| (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 16 0.21 (1,415) 1:A:131:ASP:H 1:A:134:LYS:H 3 0.21 (1,100) 1:A:58:ASP:H 1:A:59:GLY:H 6 0.21 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 12 0.2 | | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:44:LEU:HD23 | 19 | 0.21 |
| (1,415) 1:A:131:ASP:H 1:A:134:LYS:H 3 0.21 (1,100) 1:A:58:ASP:H 1:A:59:GLY:H 6 0.21 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 12 0.2 | · · / | 1:A:8:PHE:H | | 16 | |
| (1,100) 1:A:58:ASP:H 1:A:59:GLY:H 6 0.21 (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 12 0.2 | | 1:A:131:ASP:H | 1:A:134:LYS:H | 3 | 0.21 |
| (1,455) 1:A:8:PHE:H 1:A:11:ASP:H 12 0.2 | , , , | 1:A:58:ASP:H | 1:A:59:GLY:H | | 0.21 |
| | · · / | 1:A:8:PHE:H | 1:A:11:ASP:H | 12 | 0.2 |
| (1,241) | · · / | 1:A:37:ARG:H | 1:A:66:ARG:H | 13 | 0.2 |
| (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 2 0.19 | · · / | 1:A:64:VAL:HG21 | 1:A:66:ARG:H | 2 | 0.19 |
| (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 2 0.19 | | | | 2 | |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,874) | 1:A:64:VAL:HG23 | 1:A:66:ARG:H | 2 | 0.19 |
| (1,243) | 1:A:66:ARG:H | 1:A:72:LEU:HD21 | 11 | 0.19 |
| (1,243) | 1:A:66:ARG:H | 1:A:72:LEU:HD22 | 11 | 0.19 |
| (1,243) | 1:A:66:ARG:H | 1:A:72:LEU:HD23 | 11 | 0.19 |
| (1,647) | 1:A:103:MET:H | 1:A:105:LYS:H | 13 | 0.18 |
| (1,463) | 1:A:16:ASP:H | 1:A:18:PHE:H | 14 | 0.18 |
| (1,243) | 1:A:66:ARG:H | 1:A:72:LEU:HD21 | 17 | 0.18 |
| (1,243) | 1:A:66:ARG:H | 1:A:72:LEU:HD22 | 17 | 0.18 |
| (1,243) | 1:A:66:ARG:H | 1:A:72:LEU:HD23 | 17 | 0.18 |
| (1,191) | 1:A:64:VAL:HG11 | 1:A:65:GLU:H | 18 | 0.18 |
| (1,191) | 1:A:64:VAL:HG12 | 1:A:65:GLU:H | 18 | 0.18 |
| (1,191) | 1:A:64:VAL:HG13 | 1:A:65:GLU:H | 18 | 0.18 |
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG11 | 7 | 0.17 |
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG12 | 7 | 0.17 |
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG13 | 7 | 0.17 |
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG21 | 7 | 0.17 |
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG22 | 7 | 0.17 |
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG23 | 7 | 0.17 |
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG11 | 13 | 0.17 |
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG12 | 13 | 0.17 |
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG13 | 13 | 0.17 |
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG21 | 13 | 0.17 |
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG22 | 13 | 0.17 |
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG23 | 13 | 0.17 |
| (1,93) | 1:A:39:GLU:H | 1:A:40:GLY:H | 6 | 0.17 |
| (1,919) | 1:A:18:PHE:HZ | 1:A:73:ASN:HD21 | 7 | 0.17 |
| (1,919) | 1:A:18:PHE:HZ | 1:A:73:ASN:HD22 | 7 | 0.17 |
| (1,730) | 1:A:27:VAL:HG11 | 1:A:120:ILE:HD11 | 11 | 0.17 |
| (1,730) | 1:A:27:VAL:HG11 | 1:A:120:ILE:HD12 | 11 | 0.17 |
| (1,730) | 1:A:27:VAL:HG11 | 1:A:120:ILE:HD13 | 11 | 0.17 |
| (1,730) | 1:A:27:VAL:HG12 | 1:A:120:ILE:HD11 | 11 | 0.17 |
| (1,730) | 1:A:27:VAL:HG12 | 1:A:120:ILE:HD12 | 11 | 0.17 |
| (1,730) | 1:A:27:VAL:HG12 | 1:A:120:ILE:HD13 | 11 | 0.17 |
| (1,730) | 1:A:27:VAL:HG13 | 1:A:120:ILE:HD11 | 11 | 0.17 |
| (1,730) | 1:A:27:VAL:HG13 | 1:A:120:ILE:HD12 | 11 | 0.17 |
| (1,730) | 1:A:27:VAL:HG13 | 1:A:120:ILE:HD13 | 11 | 0.17 |
| (1,455) | 1:A:8:PHE:H | 1:A:11:ASP:H | 19 | 0.17 |
| (1,415) | 1:A:131:ASP:H | 1:A:134:LYS:H | 8 | 0.17 |
| (1,405) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:25:ASP:H | 8 | 0.17 |
| (1,241) | 1:A:37:ARG:H | 1:A:66:ARG:H | 10 | 0.17 |
| (1,108) | 1:A:15:SER:H | 1:A:18:PHE:HD1 | 10 | 0.17 |
| (1,108) | 1:A:15:SER:H | 1:A:18:PHE:HD2 | 10 | 0.17 |



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

| (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 3 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 6 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 6 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 6 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 6 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,874) 1:A:63:VAL:HG12 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,891) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 2 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 2 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 2 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 2 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,497) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 2 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 2 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD12 2 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD13 2 0.16 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,949) 1:A:153:ASN:HD22 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,940) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,941) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,942) 1:A:153:ASN:HD22 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,942) 1:A:153:ASN:HD22 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,942) 1:A:153:ASN:HD22 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,942) 1:A:153:ASN:HD22 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,941) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,942) 1:A:165:ASN:HD22 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,951) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 (1,7 | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 6 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 6 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 6 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,462) 1:A:182:LEU:H 1:A:183:GLU:H 14 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 2 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 2 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 2 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,401) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 2 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 2 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 2 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 2 0.16 (1,1947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,949) 1:A:135:ASN:HD22 1:A:136:LEU:H 12 0.15 (1,940) 1:A:166:ASN:HD21 1:A:136:LEU:H 12 0.15 (1,941) 1:A:166:ASN:HD22 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,942) 1:A:136:ASN:HD22 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,942) 1:A:136:ASN:HD22 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,942) 1:A:136:ASN:HD22 1:A:136:LEU:H 12 0.15 (1,942) 1:A:136:ASN:HD22 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,942) 1:A:136:ASN:HD22 1:A:1 | (1,93) | 1:A:39:GLU:H | 1:A:40:GLY:H | 15 | 0.16 |
| (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 6 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 6 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,462) 1:A:182:LEU:H 1:A:183:GLU:H 14 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 2 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 2 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 2 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 2 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 2 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD12 2 0.16 (1,140) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD13 2 0.16 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 1 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,949) 1:A:135:ASN:HD21 1:A:16:ILE:HD13 14 0.15 (1,949) 1:A:135:ASN:HD21 1:A:186:LEU:H 12 0.15 (1,929) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:186:LEU:H 12 0.15 (1,929) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:186:LEU:H 12 0.15 (1,929) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:186:LEU:H 12 0.15 (1,959) 1:A:136:ASN:HD21 1:A:186:LEU:H 12 0.15 (1,959) 1:A:136:ASN:HD22 1:A:197:ASN:H 2 0.15 (1,950) 1:A:136:ASN:HD21 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,950) 1:A:136:ASN:HD21 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,950) 1:A:136:ASN:HD21 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,951) 1:A:166:ASN:HD21 1:A:146:LEU:HD23 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0 | (1,89) | 1:A:162:ASP:H | 1:A:163:GLY:H | 3 | 0.16 |
| (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 6 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,482) 1:A:182:LEU:H 1:A:183:GLU:H 14 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 2 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 2 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 2 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 2 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,401) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 2 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 2 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 2 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 2 0.16 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 2 0.16 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,947) 1:A:166:ANR:HD12 1:A:186:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A:166:ANR:HD12 1:A:146:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A: | (1,874) | 1:A:64:VAL:HG21 | 1:A:66:ARG:H | 6 | 0.16 |
| (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,462) 1:A:182:LEU:H 1:A:183:GLU:H 14 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 2 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 2 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:24:LEU:H 1:A:24:LEU:H 18 0.16 (1,400) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 2 0.16 (1,407) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 | (1,874) | 1:A:64:VAL:HG22 | 1:A:66:ARG:H | 6 | 0.16 |
| (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 2 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 2 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:42:EU:HG12 1:A:44:LEU:H 18 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 2 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD13 2 0.16 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD12 <t< td=""><td>(1,874)</td><td>1:A:64:VAL:HG23</td><td>1:A:66:ARG:H</td><td>6</td><td>0.16</td></t<> | (1,874) | 1:A:64:VAL:HG23 | 1:A:66:ARG:H | 6 | 0.16 |
| (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 18 0.16 (1,462) 1:A:182:LEU:H 1:A:183:GLU:H 14 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 2 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 2 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:42:LEU:H 1:A:44:LEU:H 18 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD12 2 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD13 2 0.16 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:LE:HD11 14 | (1,874) | 1:A:64:VAL:HG21 | 1:A:66:ARG:H | 18 | 0.16 |
| (1,462) 1:A:182:LEU:H 1:A:183:GLU:H 14 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 2 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 2 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 2 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 2 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:H 1912 2 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 2 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD13 2 0.16 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 2 0.16 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,949) 1:A:135:ASN:HD22 1:A:136:LEU:H 12 0.15 (1,949) 1:A:135:ASN:HD22 1:A:136:LEU:H 12 0.15 (1,949) 1:A:106:ASN:HD22 1:A:136:LEU:H 12 0.15 (1,949) 1:A:106:ASN:HD22 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,929) 1:A:106:ASN:HD22 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,929) 1:A:106:ASN:HD22 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD11 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD11 1:A:64:VAL:HG21 7 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 7 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 7 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1: | (1,874) | 1:A:64:VAL:HG22 | 1:A:66:ARG:H | 18 | 0.16 |
| (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 2 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 2 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 2 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:H 19 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 2 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD12 2 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD13 2 0.16 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,942) 1:A:135:ASN:HD22 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,942) 1:A:135:ASN:HD21 1:A:136:LEU:H 12 0.15 (1,942) 1:A:135:ASN:HD22 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,942) 1:A:135:ASN:HD21 1:A:186:LEU:H 12 0.15 (1,929) 1:A:106:ASN:HD22 1:A:186:LEU:H 12 0.15 (1,929) 1:A:106:ASN:HD22 1:A:197:ASN:H 2 0.15 (1,929) 1:A:106:ASN:HD22 1:A:197:ASN:H 2 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD11 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD13 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD13 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,865) 1:A:6:CGLU:H 1:A:64:VAL:HG21 7 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 7 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 7 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 | (1,874) | 1:A:64:VAL:HG23 | 1:A:66:ARG:H | 18 | 0.16 |
| (1,391) | (1,462) | 1:A:182:LEU:H | 1:A:183:GLU:H | 14 | 0.16 |
| (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 2 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 2 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD12 2 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD12 2 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:146:LEU:HD13 2 0.16 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A:135:ASN:HD22 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,942) 1:A:135:ASN:HD21 1:A:136:LEU:H 12 0.15 (1,942) 1:A:135:ASN:HD21 1:A:136:LEU:H 12 0.15 (1,929) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:136:LEU:H 12 0.15 (1,929) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,929) 1:A:106:ASN:HD22 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD11 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD13 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD13 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 7 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 7 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 7 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 | (1,391) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:H | 2 | 0.16 |
| (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 2 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD12 2 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD13 2 0.16 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A:135:ASN:HD22 | (1,391) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:H | 2 | 0.16 |
| (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 2 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD12 2 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD13 2 0.16 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,947) 1:A:153:ASN:HD22 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A:153:ASN:HD22 1:A:136:LEU:H 12 0.15 (1,942) 1:A:135:ASN:HD21 1:A:136:LEU:H 12 0.15 (1,929) 1:A:16:ASN:HD21 < | (1,391) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:H | 2 | 0.16 |
| (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 18 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 2 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD12 2 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD13 2 0.16 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,947) 1:A:135:ASN:HD22 1:A:136:ILE:HD13 14 0.15 (1,942) 1:A:135:ASN:HD21 1:A:136:LEU:H 12 0.15 (1,942) 1:A:166:ASN:HD21 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,929) 1:A:166:ASN:HD21 | (1,391) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:H | 18 | 0.16 |
| (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 2 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD12 2 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD13 2 0.16 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,942) 1:A:135:ASN:HD21 1:A:136:LE:HD13 14 0.15 (1,942) 1:A:135:ASN:HD2 | (1,391) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:H | 18 | 0.16 |
| (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD12 2 0.16 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD13 2 0.16 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,942) 1:A:135:ASN:HD21 1:A:136:LEU:H 12 0.15 (1,942) 1:A:106:ASN:HD22 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,929) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD11 | (1,391) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:H | 18 | 0.16 |
| (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD13 2 0.16 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,942) 1:A:135:ASN:HD22 1:A:136:LEU:H 12 0.15 (1,942) 1:A:106:ASN:HD22 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,929) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD11 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,865) 1:A:62:GLU:H | (1,160) | 1:A:44:LEU:H | 1:A:44:LEU:HD11 | 2 | 0.16 |
| (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,940) 1:A:135:ASN:HD22 1:A:136:LEU:H 12 0.15 (1,942) 1:A:135:ASN:HD22 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,929) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,865) 1:A:61: | (1,160) | 1:A:44:LEU:H | 1:A:44:LEU:HD12 | 2 | 0.16 |
| (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,942) 1:A:135:ASN:HD22 1:A:136:LEU:H 12 0.15 (1,942) 1:A:135:ASN:HD22 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,942) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,942) 1:A:106:ASN:HD22 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,929) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD11< | (1,160) | 1:A:44:LEU:H | 1:A:44:LEU:HD13 | 2 | 0.16 |
| (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A:135:ASN:HD21 1:A:136:LEU:H 12 0.15 (1,942) 1:A:135:ASN:HD21 1:A:136:LEU:H 12 0.15 (1,942) 1:A:106:ASN:HD22 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,929) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,929) 1:A:106:ASN:HD22 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD11 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD12 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,865) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 7 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 7 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:H | (1,947) | 1:A:152:GLN:HE21 | 1:A:176:ILE:HD11 | 14 | 0.15 |
| (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,947) 1:A:135:ASN:HD21 1:A:136:LEU:H 12 0.15 (1,942) 1:A:135:ASN:HD22 1:A:136:LEU:H 12 0.15 (1,942) 1:A:106:ASN:HD22 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,929) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,929) 1:A:106:ASN:HD22 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD11 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD12 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD13 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 7 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 7 0.15 (1,79) 1:A:13:LEU:H 1:A:44:LEU:HD21 | (1,947) | 1:A:152:GLN:HE21 | 1:A:176:ILE:HD12 | 14 | 0.15 |
| (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 14 0.15 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,942) 1:A:135:ASN:HD21 1:A:136:LEU:H 12 0.15 (1,942) 1:A:135:ASN:HD22 1:A:136:LEU:H 12 0.15 (1,929) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,929) 1:A:106:ASN:HD22 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD11 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD12 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,865) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 7 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 7 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 7 0.15 (1,79) 1:A:13:LEU:H 1:A:14:SER:H 17 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD21 | (1,947) | 1:A:152:GLN:HE21 | 1:A:176:ILE:HD13 | 14 | 0.15 |
| (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 14 0.15 (1,942) 1:A:135:ASN:HD21 1:A:136:LEU:H 12 0.15 (1,942) 1:A:135:ASN:HD22 1:A:136:LEU:H 12 0.15 (1,929) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,929) 1:A:106:ASN:HD22 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD11 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD12 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD13 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 7 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 7 0.15 (1,780) 1:A:13:LEU:H 1:A:14:SER:H 17 0.15 (1,79) 1:A:13:LEU:H 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD21 <t< td=""><td>(1,947)</td><td>1:A:152:GLN:HE22</td><td>1:A:176:ILE:HD11</td><td>14</td><td>0.15</td></t<> | (1,947) | 1:A:152:GLN:HE22 | 1:A:176:ILE:HD11 | 14 | 0.15 |
| (1,942) 1:A:135:ASN:HD21 1:A:136:LEU:H 12 0.15 (1,942) 1:A:135:ASN:HD22 1:A:136:LEU:H 12 0.15 (1,929) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,929) 1:A:106:ASN:HD22 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD11 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD12 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD13 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 7 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 7 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 7 0.15 (1,790) 1:A:13:LEU:H 1:A:14:SER:H 17 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 | (1,947) | 1:A:152:GLN:HE22 | 1:A:176:ILE:HD12 | 14 | 0.15 |
| (1,942) 1:A:135:ASN:HD22 1:A:136:LEU:H 12 0.15 (1,929) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,929) 1:A:106:ASN:HD22 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD11 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD12 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD13 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 7 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 7 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 7 0.15 (1,79) 1:A:13:LEU:H 1:A:14:SER:H 17 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 <td>(1,947)</td> <td>1:A:152:GLN:HE22</td> <td>1:A:176:ILE:HD13</td> <td>14</td> <td>0.15</td> | (1,947) | 1:A:152:GLN:HE22 | 1:A:176:ILE:HD13 | 14 | 0.15 |
| (1,929) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,929) 1:A:106:ASN:HD22 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD11 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD12 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD13 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,865) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 7 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 7 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 7 0.15 (1,79) 1:A:13:LEU:H 1:A:14:SER:H 17 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 <td>(1,942)</td> <td>1:A:135:ASN:HD21</td> <td>1:A:136:LEU:H</td> <td>12</td> <td>0.15</td> | (1,942) | 1:A:135:ASN:HD21 | 1:A:136:LEU:H | 12 | 0.15 |
| (1,929) 1:A:106:ASN:HD22 1:A:107:ASN:H 2 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD11 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD12 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD13 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 7 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 7 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 7 0.15 (1,79) 1:A:13:LEU:H 1:A:14:SER:H 17 0.15 (1,79) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 | (1,942) | 1:A:135:ASN:HD22 | 1:A:136:LEU:H | 12 | 0.15 |
| (1,865) 1:A:7:ILE:HD11 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD12 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD13 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 7 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 7 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 7 0.15 (1,79) 1:A:13:LEU:H 1:A:14:SER:H 17 0.15 (1,79) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 | (1,929) | 1:A:106:ASN:HD21 | 1:A:107:ASN:H | 2 | 0.15 |
| (1,865) 1:A:7:ILE:HD12 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,865) 1:A:7:ILE:HD13 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 7 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 7 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 7 0.15 (1,79) 1:A:13:LEU:H 1:A:14:SER:H 17 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 | (1,929) | 1:A:106:ASN:HD22 | 1:A:107:ASN:H | 2 | 0.15 |
| (1,865) 1:A:7:ILE:HD13 1:A:8:PHE:H 6 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 7 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 7 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 7 0.15 (1,79) 1:A:13:LEU:H 1:A:14:SER:H 17 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 | (1,865) | 1:A:7:ILE:HD11 | 1:A:8:PHE:H | 6 | 0.15 |
| (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 7 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 7 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 7 0.15 (1,79) 1:A:13:LEU:H 1:A:14:SER:H 17 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 | (1,865) | 1:A:7:ILE:HD12 | 1:A:8:PHE:H | 6 | 0.15 |
| (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 7 0.15 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 7 0.15 (1,79) 1:A:13:LEU:H 1:A:14:SER:H 17 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 | (1,865) | 1:A:7:ILE:HD13 | 1:A:8:PHE:H | 6 | 0.15 |
| (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 7 0.15 (1,79) 1:A:13:LEU:H 1:A:14:SER:H 17 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 | (1,862) | 1:A:62:GLU:H | 1:A:64:VAL:HG21 | 7 | 0.15 |
| (1,79) 1:A:13:LEU:H 1:A:14:SER:H 17 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 | (1,862) | 1:A:62:GLU:H | 1:A:64:VAL:HG22 | 7 | 0.15 |
| (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 | (1,862) | 1:A:62:GLU:H | 1:A:64:VAL:HG23 | 7 | 0.15 |
| (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 | · · / | 1:A:13:LEU:H | 1:A:14:SER:H | 17 | 0.15 |
| (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 | (1,751) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:44:LEU:HD21 | 3 | 0.15 |
| (1,751) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 | | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:44:LEU:HD22 | 3 | 0.15 |
| (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD21 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 | (1,751) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:44:LEU:HD23 | 3 | 0.15 |
| (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD22 3 0.15 (1,751) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:44:LEU:HD23 3 0.15 | · · / | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:44:LEU:HD21 | 3 | 0.15 |
| | (1,751) | | 1:A:44:LEU:HD22 | 3 | 0.15 |
| | (1,751) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:44:LEU:HD23 | 3 | 0.15 |
| $\{(1,101), (1.11,000,011.010), (1.11,111.010), (1.11.021), (1.11.010), (1.11.021), (1.11.010), (1.11.$ | (1,751) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:44:LEU:HD21 | 3 | 0.15 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,751) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:44:LEU:HD22 | 3 | 0.15 |
| (1,751) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:44:LEU:HD23 | 3 | 0.15 |
| (1,655) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:53:GLU:H | 7 | 0.15 |
| (1,391) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:H | 3 | 0.15 |
| (1,391) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:H | 3 | 0.15 |
| (1,391) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:H | 3 | 0.15 |
| (1,384) | 1:A:104:GLU:H | 1:A:108:ARG:H | 16 | 0.15 |
| (1,194) | 1:A:176:ILE:HD11 | 1:A:177:ILE:H | 11 | 0.15 |
| (1,194) | 1:A:176:ILE:HD12 | 1:A:177:ILE:H | 11 | 0.15 |
| (1,194) | 1:A:176:ILE:HD13 | 1:A:177:ILE:H | 11 | 0.15 |
| (1,192) | 1:A:37:ARG:H | 1:A:72:LEU:HD21 | 19 | 0.15 |
| (1,192) | 1:A:37:ARG:H | 1:A:72:LEU:HD22 | 19 | 0.15 |
| (1,192) | 1:A:37:ARG:H | 1:A:72:LEU:HD23 | 19 | 0.15 |
| (1,98) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:67:GLY:H | 20 | 0.14 |
| (1,98) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:67:GLY:H | 20 | 0.14 |
| (1,98) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:67:GLY:H | 20 | 0.14 |
| (1,942) | 1:A:135:ASN:HD21 | 1:A:136:LEU:H | 14 | 0.14 |
| (1,942) | 1:A:135:ASN:HD22 | 1:A:136:LEU:H | 14 | 0.14 |
| (1,93) | 1:A:39:GLU:H | 1:A:40:GLY:H | 16 | 0.14 |
| (1,901) | 1:A:156:ILE:H | 1:A:169:LEU:HD11 | 8 | 0.14 |
| (1,901) | 1:A:156:ILE:H | 1:A:169:LEU:HD12 | 8 | 0.14 |
| (1,901) | 1:A:156:ILE:H | 1:A:169:LEU:HD13 | 8 | 0.14 |
| (1,90) | 1:A:161:VAL:H | 1:A:163:GLY:H | 9 | 0.14 |
| (1,860) | 1:A:139:PHE:H | 1:A:153:VAL:HG21 | 7 | 0.14 |
| (1,860) | 1:A:139:PHE:H | 1:A:153:VAL:HG22 | 7 | 0.14 |
| (1,860) | 1:A:139:PHE:H | 1:A:153:VAL:HG23 | 7 | 0.14 |
| (1,820) | 1:A:76:LEU:HD21 | 1:A:140:ILE:H | 9 | 0.14 |
| (1,820) | 1:A:76:LEU:HD22 | 1:A:140:ILE:H | 9 | 0.14 |
| (1,820) | 1:A:76:LEU:HD23 | 1:A:140:ILE:H | 9 | 0.14 |
| (1,808) | 1:A:121:GLN:HE22 | 1:A:125:VAL:HG11 | 10 | 0.14 |
| (1,808) | 1:A:121:GLN:HE22 | 1:A:125:VAL:HG12 | 10 | 0.14 |
| (1,808) | 1:A:121:GLN:HE22 | 1:A:125:VAL:HG13 | 10 | 0.14 |
| (1,79) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:14:SER:H | 4 | 0.14 |
| (1,79) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:14:SER:H | 13 | 0.14 |
| (1,766) | 1:A:77:VAL:HG11 | 1:A:140:ILE:HD11 | 10 | 0.14 |
| (1,766) | 1:A:77:VAL:HG11 | 1:A:140:ILE:HD12 | 10 | 0.14 |
| (1,766) | 1:A:77:VAL:HG11 | 1:A:140:ILE:HD13 | 10 | 0.14 |
| (1,766) | 1:A:77:VAL:HG12 | 1:A:140:ILE:HD11 | 10 | 0.14 |
| (1,766) | 1:A:77:VAL:HG12 | 1:A:140:ILE:HD12 | 10 | 0.14 |
| (1,766) | 1:A:77:VAL:HG12 | 1:A:140:ILE:HD13 | 10 | 0.14 |
| (1,766) | 1:A:77:VAL:HG13 | 1:A:140:ILE:HD11 | 10 | 0.14 |
| (1,766) | 1:A:77:VAL:HG13 | 1:A:140:ILE:HD12 | 10 | 0.14 |
| (): 00) | | | | ort i |



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

| (1,766 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 2 0.14 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 2 0.14 (1,650 1:A:4:TYR:HD2 1:A:14:SER:H 2 0.14 (1,650 1:A:38:LYS:H 1:A:41:GU:H 1 0.14 (1,391 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 9 0.14 (1,391 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 9 0.14 (1,391 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 9 0.14 (1,288 1:A:2:LEU:HD11 1:A:3:ILE:H 2 0.14 (1,288 1:A:2:LEU:HD11 1:A:3:ILE:H 2 0.14 (1,288 1:A:2:LEU:HD12 1:A:3:ILE:H 2 0.14 (1,288 1:A:2:LEU:HD13 1:A:3:ILE:H 2 0.14 (1,174 1:A:22:LEU:H 1:A:28:TYR:HD1 18 0.14 (1,174 1:A:22:LEU:H 1:A:28:TYR:HD2 18 0.14 (1,174 1:A:22:LEU:H 1:A:28:TYR:HD2 18 0.14 (1,1009 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 6 0.14 (1,1009 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 11 0.14 (1,977 1:A:2:LEU:H 1:A:166:VAL:HG12 10 0.13 (1,951 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,950 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 14 0.13 (1,950 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 14 0.13 (1,950 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 14 0.13 (1,960 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 14 0.13 (1,960 1:A:130:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 14 0.13 (1,860 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 15 0.13 (1,860 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|--|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,76) 1:A:4:TYR:HD2 1:A:14:SER:H 2 0.14 (1,650) 1:A:38:DYS:H 1:A:41:GLU:H 1 0.14 (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 9 0.14 (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 9 0.14 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 9 0.14 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 9 0.14 (1,288) 1:A:2:LEU:HD11 1:A:3:ILE:H 2 0.14 (1,288) 1:A:2:LEU:HD12 1:A:3:ILE:H 2 0.14 (1,288) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:3:ILE:H 2 0.14 (1,288) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:3:ILE:H 2 0.14 (1,174) 1:A:22:LEU:H 1:A:28:TYR:HD1 18 0.14 (1,174) 1:A:22:LEU:H 1:A:28:TYR:HD2 18 0.14 (1,177) 1:A:2:LEU:H 1:A:170:MET:O 6 0.14 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 6 0.14 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 11 0.14 (1,977) 1:A:2:LEU:H 1:A:16:ASP:O 3 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG11 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG12 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG23 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG23 10 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,960) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,960) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 16 0.13 | (1,766) | 1:A:77:VAL:HG13 | 1:A:140:ILE:HD13 | 10 | 0.14 |
| (1,650) 1:A:38:LYS:H 1:A:41:GLU:H 1 0.14 (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 9 0.14 (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 9 0.14 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 9 0.14 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 9 0.14 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 9 0.14 (1,288) 1:A:2:LEU:HD11 1:A:3:ILE:H 2 0.14 (1,288) 1:A:2:LEU:HD12 1:A:3:ILE:H 2 0.14 (1,288) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:3:ILE:H 2 0.14 (1,174) 1:A:22:LEU:H 1:A:28:TYR:HD1 18 0.14 (1,174) 1:A:22:LEU:H 1:A:28:TYR:HD1 18 0.14 (1,174) 1:A:22:LEU:H 1:A:28:TYR:HD1 18 0.14 (1,174) 1:A:22:LEU:H 1:A:170:MET:O 6 0.14 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 11 0.14 (1,909) 1:A:155:ILE:H 1:A:166:VAL:HG11 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG11 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG12 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG13 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG21 10 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,960) 1:A:130:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 15 0.13 (1,860) 1:A:130:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 16 0.13 (1,860) 1:A:130:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 16 0.13 (1,860) 1:A:130:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 16 0.13 (1,860) 1:A:130:PHE:H 1:A:153: | (1,76) | 1:A:4:TYR:HD1 | 1:A:14:SER:H | 2 | 0.14 |
| (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 9 0.14 (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 9 0.14 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 9 0.14 (1,288) 1:A:2:LEU:HD11 1:A:3:ILE:H 2 0.14 (1,288) 1:A:2:LEU:HD12 1:A:3:ILE:H 2 0.14 (1,288) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:3:ILE:H 2 0.14 (1,288) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:3:ILE:H 2 0.14 (1,174) 1:A:22:LEU:H 1:A:28:TYR:HD1 18 0.14 (1,174) 1:A:22:LEU:H 1:A:28:TYR:HD2 18 0.14 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 6 0.14 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 11 0.14 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 11 0.14 (1,977) 1:A:2:LEU:H 1:A:16:ASP:O 3 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG11 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG12 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG12 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG12 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG23 10 0.13 (1,951) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,960) 1:A:130:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 14 0.13 (1,860) 1:A:130:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 15 0.13 (1,860) 1:A:130:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 16 0.13 (1,860) 1:A:130:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 16 0.13 (1,860) 1:A:130:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 16 0.13 (1,860) 1:A:130:PHE:H 1:A:1 | (1,76) | 1:A:4:TYR:HD2 | 1:A:14:SER:H | 2 | 0.14 |
| (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 9 0.14 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 9 0.14 (1,288) 1:A:2:LEU:HD11 1:A:3:ILE:H 2 0.14 (1,288) 1:A:2:LEU:HD12 1:A:3:ILE:H 2 0.14 (1,288) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:3:ILE:H 2 0.14 (1,288) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:3:ILE:H 2 0.14 (1,174) 1:A:2:LEU:H 1:A:28:TYR:HD2 18 0.14 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 6 0.14 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 11 0.14 (1,909) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG11 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG12 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG21 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG21 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 <td>(1,650)</td> <td>1:A:38:LYS:H</td> <td>1:A:41:GLU:H</td> <td>1</td> <td>0.14</td> | (1,650) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:41:GLU:H | 1 | 0.14 |
| (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 9 0.14 (1,288) 1:A:2:LEU:HD11 1:A:3:ILE:H 2 0.14 (1,288) 1:A:2:LEU:HD12 1:A:3:ILE:H 2 0.14 (1,288) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:3:ILE:H 2 0.14 (1,288) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:3:ILE:H 2 0.14 (1,174) 1:A:2:LEU:H 1:A:28:TYR:HD1 18 0.14 (1,174) 1:A:2:LEU:H 1:A:28:TYR:HD2 18 0.14 (1,174) 1:A:2:LEU:H 1:A:28:TYR:HD2 18 0.14 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 6 0.14 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 11 0.14 (1,977) 1:A:2:LEU:H 1:A:166:VAL:HG11 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG11 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG12 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG12 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 10 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:190:PHE:H 1:A:156:VAL:HG23 14 0.13 (1,960) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 15 0.13 (1,960) 1:A:139:PHE: | (1,391) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:H | 9 | 0.14 |
| (1,288) 1:A:2:LEU:HD11 1:A:3:ILE:H 2 0.14 (1,288) 1:A:2:LEU:HD12 1:A:3:ILE:H 2 0.14 (1,288) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:3:ILE:H 2 0.14 (1,174) 1:A:2:LEU:H 1:A:28:TYR:HD1 18 0.14 (1,174) 1:A:2:LEU:H 1:A:28:TYR:HD2 18 0.14 (1,174) 1:A:2:LEU:H 1:A:170:MET:O 6 0.14 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 6 0.14 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 1 0.14 (1,977) 1:A:2:LEU:H 1:A:166:VAL:HG11 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG12 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG13 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,951) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 10 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 14 | (1,391) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:H | 9 | 0.14 |
| (1,288) 1:A:2:LEU:HD12 1:A:3:ILE:H 2 0.14 (1,288) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:3:ILE:H 2 0.14 (1,174) 1:A:2:EU:H 1:A:28:TYR:HD1 18 0.14 (1,174) 1:A:2:EU:H 1:A:28:TYR:HD2 18 0.14 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 6 0.14 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:16:NET:O 11 0.14 (1,977) 1:A:2:LEU:H 1:A:16:ASP:O 3 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG11 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG12 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG13 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,951) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 14< | (1,391) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:H | 9 | 0.14 |
| (1,288) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:3:ILE:H 2 0.14 (1,174) 1:A:2:LEU:H 1:A:28:TYR:HD1 18 0.14 (1,174) 1:A:2:LEU:H 1:A:28:TYR:HD2 18 0.14 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 6 0.14 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 6 0.14 (1,977) 1:A:2:LEU:H 1:A:166:SPO 3 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG11 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG12 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG21 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,951) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 10 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 < | (1,288) | 1:A:2:LEU:HD11 | 1:A:3:ILE:H | 2 | 0.14 |
| (1,174) 1:A:22:LEU:H 1:A:28:TYR:HD1 18 0.14 (1,174) 1:A:22:LEU:H 1:A:28:TYR:HD2 18 0.14 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 6 0.14 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 11 0.14 (1,977) 1:A:2:LEU:H 1:A:16:ASP:O 3 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG11 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG12 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 14 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:166:VAL:HG21 14 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 16 0 | (1,288) | 1:A:2:LEU:HD12 | 1:A:3:ILE:H | | 0.14 |
| (1,174) 1:A:22:LEU:H 1:A:28:TYR:HD2 18 0.14 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 6 0.14 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 11 0.14 (1,977) 1:A:2:LEU:H 1:A:16:ASP:O 3 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG11 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG12 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG21 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 10 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 <td>(1,288)</td> <td>1:A:2:LEU:HD13</td> <td>1:A:3:ILE:H</td> <td>2</td> <td>0.14</td> | (1,288) | 1:A:2:LEU:HD13 | 1:A:3:ILE:H | 2 | 0.14 |
| (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 6 0.14 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 11 0.14 (1,977) 1:A:2:LEU:H 1:A:16:ASP:O 3 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HGI1 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HGI2 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG23 10 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG33 10 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 14 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 19 0.13 | (1,174) | 1:A:22:LEU:H | 1:A:28:TYR:HD1 | 18 | 0.14 |
| (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 11 0.14 (1,977) 1:A:2:LEU:H 1:A:16:ASP:O 3 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG11 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG12 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG21 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG23 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG23 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG23 10 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:H | (1,174) | 1:A:22:LEU:H | 1:A:28:TYR:HD2 | 18 | 0.14 |
| (1,977) 1:A:2:LEU:H 1:A:16:ASP:O 3 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG11 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG12 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG13 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG21 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:166:VAL:HG23 14 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG: | (1,1009) | 1:A:155:ILE:H | 1:A:170:MET:O | 6 | 0.14 |
| (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG11 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG12 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG13 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG21 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG23 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG23 10 0.13 (1,951) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 10 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A: | (1,1009) | 1:A:155:ILE:H | 1:A:170:MET:O | 11 | 0.14 |
| (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG12 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG13 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG21 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG23 10 0.13 (1,951) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 14 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1: | | 1:A:2:LEU:H | 1:A:16:ASP:O | 3 | 0.13 |
| (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG13 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG21 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG23 10 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 14 0.13 (1,960) 1:A:140:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 14 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1: | (1,951) | 1:A:161:VAL:H | 1:A:166:VAL:HG11 | 10 | 0.13 |
| (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG21 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG23 10 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,93) 1:A:39:GU:H 1:A:466:VAL:HG23 14 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:H | (1,951) | 1:A:161:VAL:H | 1:A:166:VAL:HG12 | 10 | 0.13 |
| (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG22 10 0.13 (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG23 10 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 14 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:66: | (1,951) | 1:A:161:VAL:H | 1:A:166:VAL:HG13 | 10 | 0.13 |
| (1,951) 1:A:161:VAL:H 1:A:166:VAL:HG23 10 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 14 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,874) 1:A:62:GLU:H 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:H | (1,951) | 1:A:161:VAL:H | 1:A:166:VAL:HG21 | 10 | 0.13 |
| (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 14 0.13 (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 2 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 14 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 | (1,951) | 1:A:161:VAL:H | 1:A:166:VAL:HG22 | 10 | 0.13 |
| (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 14 0.13 (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 2 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,874) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 14 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 | (1,951) | 1:A:161:VAL:H | 1:A:166:VAL:HG23 | 10 | 0.13 |
| (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 14 0.13 (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 2 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,874) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 14 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 | (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG11 | 14 | 0.13 |
| (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG21 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 14 0.13 (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 2 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 14 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 | (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG12 | 14 | 0.13 |
| (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG22 14 0.13 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 14 0.13 (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 2 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,874) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 14 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 | (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG13 | 14 | 0.13 |
| (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG23 14 0.13 (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 2 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,874) 1:A:62:GLU:H 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,874) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 14 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 | (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG21 | 14 | 0.13 |
| (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 2 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 14 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 19 0.13 | (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG22 | 14 | 0.13 |
| (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 14 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 19 0.13 | (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG23 | 14 | 0.13 |
| (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 14 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 19 0.13 | (1,93) | 1:A:39:GLU:H | 1:A:40:GLY:H | 2 | 0.13 |
| (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 14 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 19 0.13 | (1,874) | 1:A:64:VAL:HG21 | 1:A:66:ARG:H | 14 | 0.13 |
| (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 14 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 19 0.13 | (1,874) | 1:A:64:VAL:HG22 | 1:A:66:ARG:H | 14 | 0.13 |
| (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 14 0.13 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 14 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 19 0.13 | (1,874) | 1:A:64:VAL:HG23 | 1:A:66:ARG:H | 14 | 0.13 |
| (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 14 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 19 0.13 | _ ` ' / | 1:A:62:GLU:H | 1:A:64:VAL:HG21 | 14 | 0.13 |
| (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 19 0.13 | (1,862) | 1:A:62:GLU:H | 1:A:64:VAL:HG22 | 14 | 0.13 |
| (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 19 0.13 | · · / | 1:A:62:GLU:H | 1:A:64:VAL:HG23 | 14 | 0.13 |
| (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 19 0.13 | · · / | 1:A:139:PHE:H | 1:A:153:VAL:HG21 | 15 | 0.13 |
| (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 15 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 19 0.13 | (1,860) | 1:A:139:PHE:H | 1:A:153:VAL:HG22 | 15 | 0.13 |
| (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 19 0.13 | · · / | 1:A:139:PHE:H | 1:A:153:VAL:HG23 | 15 | 0.13 |
| (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 19 0.13 | | 1:A:139:PHE:H | 1:A:153:VAL:HG21 | 16 | 0.13 |
| (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG21 19 0.13 | (1,860) | 1:A:139:PHE:H | 1:A:153:VAL:HG22 | 16 | 0.13 |
| | (1,860) | 1:A:139:PHE:H | | 16 | 0.13 |
| | (1,860) | 1:A:139:PHE:H | 1:A:153:VAL:HG21 | 19 | 0.13 |
| | · · / | 1:A:139:PHE:H | 1:A:153:VAL:HG22 | 19 | 0.13 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,860) | 1:A:139:PHE:H | 1:A:153:VAL:HG23 | 19 | 0.13 |
| (1,797) | 1:A:92:ILE:HD11 | 1:A:96:MET:H | 15 | 0.13 |
| (1,797) | 1:A:92:ILE:HD12 | 1:A:96:MET:H | 15 | 0.13 |
| (1,797) | 1:A:92:ILE:HD13 | 1:A:96:MET:H | 15 | 0.13 |
| (1,756) | 1:A:2:LEU:HD21 | 1:A:182:LEU:HD21 | 9 | 0.13 |
| (1,756) | 1:A:2:LEU:HD21 | 1:A:182:LEU:HD22 | 9 | 0.13 |
| (1,756) | 1:A:2:LEU:HD21 | 1:A:182:LEU:HD23 | 9 | 0.13 |
| (1,756) | 1:A:2:LEU:HD22 | 1:A:182:LEU:HD21 | 9 | 0.13 |
| (1,756) | 1:A:2:LEU:HD22 | 1:A:182:LEU:HD22 | 9 | 0.13 |
| (1,756) | 1:A:2:LEU:HD22 | 1:A:182:LEU:HD23 | 9 | 0.13 |
| (1,756) | 1:A:2:LEU:HD23 | 1:A:182:LEU:HD21 | 9 | 0.13 |
| (1,756) | 1:A:2:LEU:HD23 | 1:A:182:LEU:HD22 | 9 | 0.13 |
| (1,756) | 1:A:2:LEU:HD23 | 1:A:182:LEU:HD23 | 9 | 0.13 |
| (1,743) | 1:A:42:ILE:HD11 | 1:A:44:LEU:HD11 | 20 | 0.13 |
| (1,743) | 1:A:42:ILE:HD11 | 1:A:44:LEU:HD12 | 20 | 0.13 |
| (1,743) | 1:A:42:ILE:HD11 | 1:A:44:LEU:HD13 | 20 | 0.13 |
| (1,743) | 1:A:42:ILE:HD12 | 1:A:44:LEU:HD11 | 20 | 0.13 |
| (1,743) | 1:A:42:ILE:HD12 | 1:A:44:LEU:HD12 | 20 | 0.13 |
| (1,743) | 1:A:42:ILE:HD12 | 1:A:44:LEU:HD13 | 20 | 0.13 |
| (1,743) | 1:A:42:ILE:HD13 | 1:A:44:LEU:HD11 | 20 | 0.13 |
| (1,743) | 1:A:42:ILE:HD13 | 1:A:44:LEU:HD12 | 20 | 0.13 |
| (1,743) | 1:A:42:ILE:HD13 | 1:A:44:LEU:HD13 | 20 | 0.13 |
| (1,609) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:82:TYR:H | 2 | 0.13 |
| (1,601) | 1:A:28:TYR:HD1 | 1:A:171:LEU:HD11 | 9 | 0.13 |
| (1,601) | 1:A:28:TYR:HD1 | 1:A:171:LEU:HD12 | 9 | 0.13 |
| (1,601) | 1:A:28:TYR:HD1 | 1:A:171:LEU:HD13 | 9 | 0.13 |
| (1,601) | 1:A:28:TYR:HD2 | 1:A:171:LEU:HD11 | 9 | 0.13 |
| (1,601) | 1:A:28:TYR:HD2 | 1:A:171:LEU:HD12 | 9 | 0.13 |
| (1,601) | 1:A:28:TYR:HD2 | 1:A:171:LEU:HD13 | 9 | 0.13 |
| (1,517) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HD1 | 3 | 0.13 |
| (1,517) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HD2 | 3 | 0.13 |
| (1,517) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HD1 | 3 | 0.13 |
| (1,517) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HD2 | 3 | 0.13 |
| (1,517) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HD1 | 3 | 0.13 |
| (1,517) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HD2 | 3 | 0.13 |
| (1,517) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HD1 | 4 | 0.13 |
| (1,517) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HD2 | 4 | 0.13 |
| (1,517) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HD1 | 4 | 0.13 |
| (1,517) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HD2 | 4 | 0.13 |
| (1,517) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HD1 | 4 | 0.13 |
| (1,517) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HD2 | 4 | 0.13 |
| (1,500) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:153:VAL:HG21 | 20 | 0.13 |



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

| (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG22 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG21 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD2 1:A:153:VAL:HG22 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD2 1:A:153:VAL:HG23 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD2 1:A:153:VAL:HG23 20 0.13 (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 12 0.13 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 12 0.13 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 12 0.13 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 12 0.13 (1,388) 1:A:116:PHE:HD12 1:A:174:GLU:H 12 0.13 (1,388) 1:A:116:PHE:HD12 1:A:174:GLU:H 12 0.13 (1,291) 1:A:18:2*LEU:HD22 1:A:18:3*GLU:H 4 0.13 (1,291) 1:A:18:2*LEU:HD23 1:A:18:3*GLU:H 4 0.13 (1,291) 1:A:18:4*LEU:HD23 | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|--|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,500) 1:A:138:PHE:HD2 1:A:153:VAL:HG21 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD2 1:A:153:VAL:HG22 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD2 1:A:153:VAL:HG23 20 0.13 (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 12 0.13 (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 12 0.13 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 12 0.13 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 12 0.13 (1,388) 1:A:116:PHE:HD1 1:A:174:GLU:H 12 0.13 (1,388) 1:A:116:PHE:HD2 1:A:174:GLU:H 12 0.13 (1,388) 1:A:116:PHE:HD2 1:A:174:GLU:H 12 0.13 (1,388) 1:A:116:PHE:HD2 1:A:174:GLU:H 12 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD21 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD22 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD22 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD23 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,1007) 1:A:54:GLY:H 1:A:55:ALA:H 9 0.13 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 17 0.13 (1,995) 1:A:79:MET:O 1:A:138:PHE:H 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 7 0. | (1,500) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:153:VAL:HG22 | 20 | 0.13 |
| (1,500) 1:A:138:PHE:HD2 1:A:153:VAL:HG22 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD2 1:A:153:VAL:HG23 20 0.13 (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 12 0.13 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 12 0.13 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 12 0.13 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 12 0.13 (1,388) 1:A:116:PHE:HD1 1:A:174:GLU:H 12 0.13 (1,388) 1:A:116:PHE:HD1 1:A:174:GLU:H 12 0.13 (1,388) 1:A:116:PHE:HD2 1:A:174:GLU:H 12 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD21 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD22 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD23 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD23 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,107) 1:A:54:GLY:H 1:A:55:ALA:H 9 0.13 (1,107) 1:A:54:GLY:H 1:A:170:MET:O 17 0.13 (1,995) 1:A:79:MET:O 1:A:138:PHE:H 7 0.12 (1,963) 1:A:100:LE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:LE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:LE:HD11 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,963) 1:A:100:LE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:LE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:LE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:LE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:LE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:LE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:LE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,960) 1:A:13:VAL:HG11 1 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1 1:A:10:LE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:10:LE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:10:LE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:10:LE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:10:LE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:10:LE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:10:LE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:13:VAL:HG13 1:A: | (1,500) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:153:VAL:HG23 | 20 | 0.13 |
| (1,500) 1:A:138:PHE:HD2 1:A:153:VAL:HG23 20 0.13 (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 12 0.13 (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 12 0.13 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 12 0.13 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 12 0.13 (1,388) 1:A:116:PHE:HD1 1:A:174:GLU:H 12 0.13 (1,388) 1:A:116:PHE:HD1 1:A:174:GLU:H 12 0.13 (1,388) 1:A:18:LEU:HD21 1:A:183:GLU:H 12 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD21 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD22 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD23 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,107) 1:A:54:GLY:H 1:A:55:ALA:H 9 0.13 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 17 0.13 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 17 0.13 (1,995) 1:A:79:MET:O 1:A:138:PHE:H 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 | (1,500) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:153:VAL:HG21 | 20 | 0.13 |
| (1,391) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:26:LEU:H 12 0.13 (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 12 0.13 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 12 0.13 (1,388) 1:A:116:PHE:HD1 1:A:174:GLU:H 12 0.13 (1,388) 1:A:16:PHE:HD2 1:A:174:GLU:H 12 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD21 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD22 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD23 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD23 1:A:183:SALA:H 9 0.13 (1,107) 1:A:452:LEU:HD23 1:A:183:SALA:H 9 0.13 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 17 0.13 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL | (1,500) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:153:VAL:HG22 | 20 | 0.13 |
| (1,391) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:26:LEU:H 12 0.13 (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 12 0.13 (1,388) 1:A:116:PHE:HD1 1:A:174:GLU:H 12 0.13 (1,388) 1:A:116:PHE:HD2 1:A:174:GLU:H 12 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD22 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD23 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD23 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD23 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,291) 1:A:45:GLY:H 1:A:55:ALA:H 9 0.13 (1,107) 1:A:54:GLY:H 1:A:55:ALA:H 9 0.13 (1,107) 1:A:79:MET:O 1:A:138:PHE:H 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:138:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 | (1,500) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:153:VAL:HG23 | 20 | 0.13 |
| (1,391) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:26:LEU:H 12 0.13 (1,388) 1:A:116:PHE:HD1 1:A:174:GLU:H 12 0.13 (1,388) 1:A:116:PHE:HD2 1:A:174:GLU:H 12 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD21 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD23 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,201) 1:A:54:GLY:H 1:A:55:ALA:H 9 0.13 (1,1007) 1:A:55:GLY:H 1:A:170:MET:O 17 0.13 (1,909) 1:A:79:MET:O 1:A:138:PHE:H 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:13:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL: | (1,391) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:H | 12 | 0.13 |
| (1,388) 1:A:116:PHE:HD1 1:A:174:GLU:H 12 0.13 (1,388) 1:A:116:PHE:HD2 1:A:174:GLU:H 12 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD21 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD22 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD22 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD23 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,107) 1:A:54:GLY:H 1:A:55:ALA:H 9 0.13 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 17 0.13 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 17 0.13 (1,995) 1:A:79:MET:O 1:A:138:PHE:H 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1 1:A:100:ILE:HD11 1 1:A:110:ILE:HD11 1 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:H | (1,391) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:H | 12 | 0.13 |
| (1,388) 1:A:116:PHE:HD2 1:A:174:GLU:H 12 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD21 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD22 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD23 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,107) 1:A:54:GLY:H 1:A:155:LE.H 1:A:170:MET:O 17 0.13 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 17 0.13 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:13:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:13:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:13:VAL:HG13 1:A: | (1,391) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:H | 12 | 0.13 |
| (1,291) 1:A:182:LEU:HD21 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD22 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD23 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,107) 1:A:54:GLY:H 1:A:55:ALA:H 9 0.13 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 17 0.13 (1,995) 1:A:79:MET:O 1:A:138:PHE:H 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,960) 1:A:13:VAL:HG11 1:A: | (1,388) | 1:A:116:PHE:HD1 | 1:A:174:GLU:H | 12 | 0.13 |
| (1,291) 1:A:182:LEU:HD22 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,291) 1:A:182:LEU:HD23 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,107) 1:A:54:GLY:H 1:A:55:ALA:H 9 0.13 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 17 0.13 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:138:PHE:H 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 <t< td=""><td>(1,388)</td><td>1:A:116:PHE:HD2</td><td>1:A:174:GLU:H</td><td>12</td><td>0.13</td></t<> | (1,388) | 1:A:116:PHE:HD2 | 1:A:174:GLU:H | 12 | 0.13 |
| (1,291) 1:A:182:LEU:HD23 1:A:183:GLU:H 4 0.13 (1,107) 1:A:54:GLY:H 1:A:55:ALA:H 9 0.13 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 17 0.13 (1,995) 1:A:79:MET:O 1:A:138:PHE:H 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,963) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 <th< td=""><td>(1,291)</td><td>1:A:182:LEU:HD21</td><td>1:A:183:GLU:H</td><td>4</td><td>0.13</td></th<> | (1,291) | 1:A:182:LEU:HD21 | 1:A:183:GLU:H | 4 | 0.13 |
| (1,107) 1:A:54:GLY:H 1:A:55:ALA:H 9 0.13 (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 17 0.13 (1,995) 1:A:79:MET:O 1:A:138:PHE:H 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 | (1,291) | 1:A:182:LEU:HD22 | 1:A:183:GLU:H | 4 | 0.13 |
| (1,1009) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 17 0.13 (1,995) 1:A:79:MET:O 1:A:138:PHE:H 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 <td>(1,291)</td> <td>1:A:182:LEU:HD23</td> <td>1:A:183:GLU:H</td> <td>4</td> <td>0.13</td> | (1,291) | 1:A:182:LEU:HD23 | 1:A:183:GLU:H | 4 | 0.13 |
| (1,995) 1:A:79:MET:O 1:A:138:PHE:H 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 | (1,107) | 1:A:54:GLY:H | 1:A:55:ALA:H | 9 | 0.13 |
| (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:V | (1,1009) | 1:A:155:ILE:H | 1:A:170:MET:O | 17 | 0.13 |
| (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:13:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VA | (1,995) | 1:A:79:MET:O | 1:A:138:PHE:H | 7 | 0.12 |
| (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:V | (1,963) | 1:A:100:ILE:HD11 | 1:A:113:VAL:HG11 | 7 | 0.12 |
| (1,963) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:V | (1,963) | 1:A:100:ILE:HD11 | 1:A:113:VAL:HG12 | 7 | 0.12 |
| (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:V | | 1:A:100:ILE:HD11 | 1:A:113:VAL:HG13 | 7 | 0.12 |
| (1,963) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,97) 1:A:40:GLY: | (1,963) | 1:A:100:ILE:HD12 | 1:A:113:VAL:HG11 | 7 | 0.12 |
| (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,93) 1:A:13:VAL:H | (1,963) | 1:A:100:ILE:HD12 | 1:A:113:VAL:HG12 | 7 | 0.12 |
| (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG12 7 0.12 (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:13:VAL: | (1,963) | 1:A:100:ILE:HD12 | 1:A:113:VAL:HG13 | 7 | 0.12 |
| (1,963) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,97) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 8 0.12 (1,97) 1: | (1,963) | 1:A:100:ILE:HD13 | 1:A:113:VAL:HG11 | 7 | 0.12 |
| (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 8 0.12 (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 8 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H | (1,963) | 1:A:100:ILE:HD13 | 1:A:113:VAL:HG12 | 7 | 0.12 |
| (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 8 0.12 (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 8 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 4 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H | (1,963) | 1:A:100:ILE:HD13 | 1:A:113:VAL:HG13 | 7 | 0.12 |
| (1,960) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,930) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 8 0.12 (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 18 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 4 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 4 0.12 | (1,960) | 1:A:113:VAL:HG11 | 1:A:100:ILE:HD11 | 7 | 0.12 |
| (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,930) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 8 0.12 (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 18 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 4 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 4 0.12 | (1,960) | 1:A:113:VAL:HG11 | 1:A:100:ILE:HD12 | 7 | 0.12 |
| (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 8 0.12 (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 18 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 4 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 4 0.12 | (1,960) | 1:A:113:VAL:HG11 | 1:A:100:ILE:HD13 | 7 | 0.12 |
| (1,960) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 8 0.12 (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 18 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 4 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 4 0.12 | (1,960) | 1:A:113:VAL:HG12 | 1:A:100:ILE:HD11 | 7 | 0.12 |
| (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 8 0.12 (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 18 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 4 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 4 0.12 | (1,960) | 1:A:113:VAL:HG12 | 1:A:100:ILE:HD12 | 7 | 0.12 |
| (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 8 0.12 (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 18 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 4 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 4 0.12 | (1,960) | 1:A:113:VAL:HG12 | 1:A:100:ILE:HD13 | 7 | 0.12 |
| (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 7 0.12 (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 8 0.12 (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 18 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 4 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 4 0.12 | (1,960) | 1:A:113:VAL:HG13 | 1:A:100:ILE:HD11 | 7 | 0.12 |
| (1,960) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 7 0.12 (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 8 0.12 (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 18 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 4 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 4 0.12 | , , , | 1:A:113:VAL:HG13 | 1:A:100:ILE:HD12 | 7 | 0.12 |
| (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 8 0.12 (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 18 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 4 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 4 0.12 | · · / | 1:A:113:VAL:HG13 | 1:A:100:ILE:HD13 | | |
| (1,93) 1:A:39:GLU:H 1:A:40:GLY:H 18 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 4 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 4 0.12 | | | | | |
| (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 4 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 4 0.12 | | | | | |
| (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 4 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 4 0.12 | · · / | | | | |
| (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 15 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 4 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 4 0.12 | · · / | | | | |
| (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 4 0.12 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 4 0.12 | / | | | | |
| (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 4 0.12 | · · / | | | | |
| | · · / | | | | |
| | (1,862) | 1:A:62:GLU:H | | | 0.12 |



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

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



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,500) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:153:VAL:HG22 | 10 | 0.12 |
| (1,500) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:153:VAL:HG23 | 10 | 0.12 |
| (1,500) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:153:VAL:HG21 | 16 | 0.12 |
| (1,500) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:153:VAL:HG22 | 16 | 0.12 |
| (1,500) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:153:VAL:HG23 | 16 | 0.12 |
| (1,500) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:153:VAL:HG21 | 16 | 0.12 |
| (1,500) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:153:VAL:HG22 | 16 | 0.12 |
| (1,500) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:153:VAL:HG23 | 16 | 0.12 |
| (1,449) | 1:A:4:TYR:HD1 | 1:A:15:SER:H | 9 | 0.12 |
| (1,449) | 1:A:4:TYR:HD2 | 1:A:15:SER:H | 9 | 0.12 |
| (1,40) | 1:A:158:TYR:H | 1:A:158:TYR:HD1 | 9 | 0.12 |
| (1,40) | 1:A:158:TYR:H | 1:A:158:TYR:HD2 | 9 | 0.12 |
| (1,391) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:H | 10 | 0.12 |
| (1,391) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:H | 10 | 0.12 |
| (1,391) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:H | 10 | 0.12 |
| (1,341) | 1:A:95:PHE:HD1 | 1:A:98:ASN:H | 13 | 0.12 |
| (1,341) | 1:A:95:PHE:HD2 | 1:A:98:ASN:H | 13 | 0.12 |
| (1,341) | 1:A:95:PHE:HD1 | 1:A:98:ASN:H | 18 | 0.12 |
| (1,341) | 1:A:95:PHE:HD2 | 1:A:98:ASN:H | 18 | 0.12 |
| (1,265) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:72:LEU:HD11 | 11 | 0.12 |
| (1,265) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:72:LEU:HD12 | 11 | 0.12 |
| (1,265) | 1:A:70:ILE:H 1:A:72:LEU:HD | | 11 | 0.12 |
| (1,223) | 1:A:6:ASP:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 14 | 0.12 |
| (1,223) | 1:A:6:ASP:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 14 | 0.12 |
| (1,223) | 1:A:6:ASP:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 14 | 0.12 |
| (1,222) | 1:A:109:ASP:H | 1:A:113:VAL:HG21 | 7 | 0.12 |
| (1,222) | 1:A:109:ASP:H | 1:A:113:VAL:HG22 | 7 | 0.12 |
| (1,222) | 1:A:109:ASP:H | 1:A:113:VAL:HG23 | 7 | 0.12 |
| (1,159) | 1:A:2:LEU:HD11 | 1:A:179:GLU:H | 18 | 0.12 |
| (1,159) | 1:A:2:LEU:HD12 | 1:A:179:GLU:H | 18 | 0.12 |
| (1,159) | 1:A:2:LEU:HD13 | 1:A:179:GLU:H | 18 | 0.12 |
| (1,148) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:78:GLU:H | 5 | 0.12 |
| (1,148) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:78:GLU:H | 5 | 0.12 |
| (1,148) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:78:GLU:H | 5 | 0.12 |
| (1,116) | 1:A:74:HIS:H | 1:A:76:LEU:HD11 | 2 | 0.12 |
| (1,116) | 1:A:74:HIS:H | 1:A:76:LEU:HD12 | 2 | 0.12 |
| (1,116) | 1:A:74:HIS:H | 1:A:76:LEU:HD13 | 2 | 0.12 |
| (1,105) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:128:LEU:H | 4 | 0.12 |
| (1,105) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:128:LEU:H | 4 | 0.12 |
| (1,105) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:128:LEU:H | 4 | 0.12 |
| (1,100) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:59:GLY:H | 4 | 0.12 |
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG11 | 5 | 0.11 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG12 | 5 | 0.11 |
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG13 | 5 | 0.11 |
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG21 | 5 | 0.11 |
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG22 | 5 | 0.11 |
| (1,950) | 1:A:160:ASP:H | 1:A:166:VAL:HG23 | 5 | 0.11 |
| (1,93) | 1:A:39:GLU:H | 1:A:40:GLY:H | 13 | 0.11 |
| (1,874) | 1:A:64:VAL:HG21 | 1:A:66:ARG:H | 16 | 0.11 |
| (1,874) | 1:A:64:VAL:HG22 | 1:A:66:ARG:H | 16 | 0.11 |
| (1,874) | 1:A:64:VAL:HG23 | 1:A:66:ARG:H | 16 | 0.11 |
| (1,798) | 1:A:169:LEU:HD21 | 1:A:170:MET:H | 5 | 0.11 |
| (1,798) | 1:A:169:LEU:HD22 | 1:A:170:MET:H | 5 | 0.11 |
| (1,798) | 1:A:169:LEU:HD23 | 1:A:170:MET:H | 5 | 0.11 |
| (1,663) | 1:A:149:GLU:H | 1:A:151:GLY:H | 5 | 0.11 |
| (1,663) | 1:A:149:GLU:H | 1:A:151:GLY:H | 13 | 0.11 |
| (1,663) | 1:A:149:GLU:H | 1:A:151:GLY:H | 14 | 0.11 |
| (1,648) | 1:A:56:GLU:H | 1:A:57:ASP:H | 1 | 0.11 |
| (1,609) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:82:TYR:H | 12 | 0.11 |
| (1,561) | 1:A:28:TYR:HD1 | 1:A:176:ILE:HD11 | 17 | 0.11 |
| (1,561) | 1:A:28:TYR:HD1 | 1:A:176:ILE:HD12 | 17 | 0.11 |
| (1,561) | 1:A:28:TYR:HD1 | 1:A:176:ILE:HD13 | 17 | 0.11 |
| (1,561) | 1:A:28:TYR:HD2 | 1:A:176:ILE:HD11 | 17 | 0.11 |
| (1,561) | 1:A:28:TYR:HD2 1:A:176:ILE:HD12 | | 17 | 0.11 |
| (1,561) | 1:A:28:TYR:HD2 | 1:A:176:ILE:HD13 | 17 | 0.11 |
| (1,553) | 1:A:124:VAL:HG11 | 1:A:128:LEU:HD21 | 20 | 0.11 |
| (1,553) | 1:A:124:VAL:HG11 | 1:A:128:LEU:HD22 | 20 | 0.11 |
| (1,553) | 1:A:124:VAL:HG11 | 1:A:128:LEU:HD23 | 20 | 0.11 |
| (1,553) | 1:A:124:VAL:HG12 | 1:A:128:LEU:HD21 | 20 | 0.11 |
| (1,553) | 1:A:124:VAL:HG12 | 1:A:128:LEU:HD22 | 20 | 0.11 |
| (1,553) | 1:A:124:VAL:HG12 | 1:A:128:LEU:HD23 | 20 | 0.11 |
| (1,553) | 1:A:124:VAL:HG13 | 1:A:128:LEU:HD21 | 20 | 0.11 |
| (1,553) | 1:A:124:VAL:HG13 | 1:A:128:LEU:HD22 | 20 | 0.11 |
| (1,553) | 1:A:124:VAL:HG13 | 1:A:128:LEU:HD23 | 20 | 0.11 |
| (1,552) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:169:LEU:HD21 | 9 | 0.11 |
| (1,552) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:169:LEU:HD22 | 9 | 0.11 |
| (1,552) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:169:LEU:HD23 | 9 | 0.11 |
| (1,552) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:169:LEU:HD21 | 9 | 0.11 |
| (1,552) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:169:LEU:HD22 | 9 | 0.11 |
| (1,552) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:169:LEU:HD23 | 9 | 0.11 |
| (1,552) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:169:LEU:HD21 | 9 | 0.11 |
| (1,552) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:169:LEU:HD22 | 9 | 0.11 |
| (1,552) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:169:LEU:HD23 | 9 | 0.11 |
| (1,540) | 1:A:133:PHE:HD1 | 1:A:136:LEU:HD21 | 3 | 0.11 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,540) | 1:A:133:PHE:HD1 | 1:A:136:LEU:HD22 | 3 | 0.11 |
| (1,540) | 1:A:133:PHE:HD1 | 1:A:136:LEU:HD23 | 3 | 0.11 |
| (1,540) | 1:A:133:PHE:HD2 | 1:A:136:LEU:HD21 | 3 | 0.11 |
| (1,540) | 1:A:133:PHE:HD2 | 1:A:136:LEU:HD22 | 3 | 0.11 |
| (1,540) | 1:A:133:PHE:HD2 | 1:A:136:LEU:HD23 | 3 | 0.11 |
| (1,391) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:H | 20 | 0.11 |
| (1,391) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:H | 20 | 0.11 |
| (1,391) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:H | 20 | 0.11 |
| (1,291) | 1:A:182:LEU:HD21 | 1:A:183:GLU:H | 19 | 0.11 |
| (1,291) | 1:A:182:LEU:HD22 | 1:A:183:GLU:H | 19 | 0.11 |
| (1,291) | 1:A:182:LEU:HD23 | 1:A:183:GLU:H | 19 | 0.11 |
| (1,265) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:72:LEU:HD11 | 18 | 0.11 |
| (1,265) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:72:LEU:HD12 | 18 | 0.11 |
| (1,265) | 1:A:70:ILE:H | 1:A:72:LEU:HD13 | 18 | 0.11 |
| (1,241) | 1:A:37:ARG:H | 1:A:66:ARG:H | 7 | 0.11 |
| (1,183) | 1:A:171:LEU:HD21 | 1:A:172:VAL:H | 7 | 0.11 |
| (1,183) | 1:A:171:LEU:HD22 | 1:A:172:VAL:H | 7 | 0.11 |
| (1,183) | 1:A:171:LEU:HD23 | 1:A:172:VAL:H | 7 | 0.11 |
| (1,160) | 1:A:44:LEU:H | 1:A:44:LEU:HD11 | 3 | 0.11 |
| (1,160) | 1:A:44:LEU:H | 1:A:44:LEU:HD12 | 3 | 0.11 |
| (1,160) | 1:A:44:LEU:H | 1:A:44:LEU:HD13 | 3 | 0.11 |
| (1,1033) | 1:A:35:VAL:O | 1:A:67:GLY:H | 13 | 0.11 |
| (1,1009) | 1:A:155:ILE:H | 1:A:170:MET:O | 5 | 0.11 |



10 Dihedral-anlge violation analysis

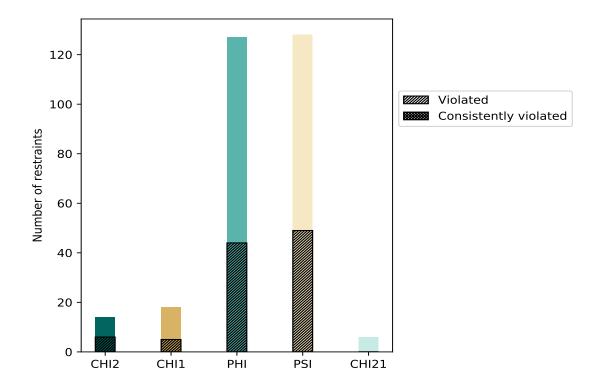
10.1 Summary of dihedral-angle violations

The following table provides the summary of dihedral-angle violations in different dihedral-angle types. Violations less than 1° are not included in the calculation.

| Angle true | Count | $\%^{1}$ | $_{\rm oz1}$ Violated ³ | | | | Consistently Violated ⁴ | | |
|------------|-------|----------|------------------------------------|--------|----------|-------|------------------------------------|--------|--|
| Angle type | Count | 70 | Count | $\%^2$ | $\%^{1}$ | Count | $\%^2$ | $\%^1$ | |
| CHI2 | 14 | 4.8 | 6 | 42.9 | 2.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | |
| CHI1 | 18 | 6.1 | 5 | 27.8 | 1.7 | 0 | 0.0 | 0.0 | |
| PHI | 127 | 43.3 | 44 | 34.6 | 15.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | |
| PSI | 128 | 43.7 | 49 | 38.3 | 16.7 | 0 | 0.0 | 0.0 | |
| CHI21 | 6 | 2.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | |
| Total | 293 | 100.0 | 104 | 35.5 | 35.5 | 0 | 0.0 | 0.0 | |

¹ percentage calculated with respect to total number of dihedral-anlge restraints, ² percentage calculated with respect to number of restraints in a particular dihedral-anlge type, ³ violated in at least one model, ⁴ violated in all the models

10.1.1 Bar chart: Distribution of dihedral-angles and violations



Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories



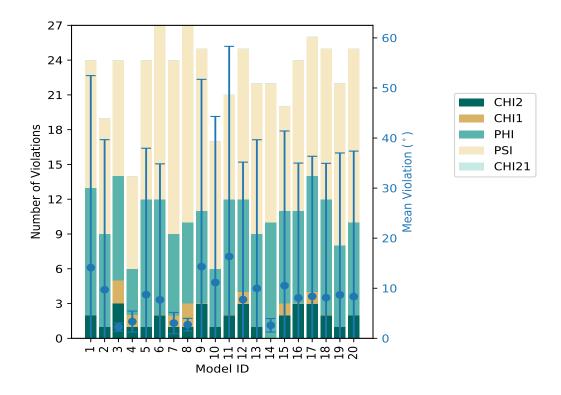
10.2 Dihedral-anlge violation statistics in each model

The following table provides the dihedral-angle violation statistics for each model in the ensemble. Violations less than 1° are not included in the statistics.

| Model ID | | Num | ber o | f viol | ations | | Mean (°) | Max (°) | Std. deviation (°) |
|----------|------|------|-------|--------|--------|-------|----------|---------|--------------------|
| Model 1D | CHI2 | CHI1 | PHI | PSI | CHI21 | Total | Wiean () | Wax () | sta. deviation () |
| 1 | 2 | 0 | 11 | 11 | 0 | 24 | 14.12 | 141.4 | 38.35 |
| 2 | 1 | 0 | 8 | 10 | 0 | 19 | 9.7 | 136.7 | 29.98 |
| 3 | 3 | 2 | 9 | 10 | 0 | 24 | 2.23 | 4.1 | 0.82 |
| 4 | 1 | 1 | 4 | 8 | 0 | 14 | 3.34 | 9.7 | 2.1 |
| 5 | 1 | 0 | 11 | 12 | 0 | 24 | 8.73 | 148.6 | 29.23 |
| 6 | 2 | 0 | 10 | 15 | 0 | 27 | 7.7 | 146.0 | 27.15 |
| 7 | 1 | 1 | 7 | 15 | 0 | 24 | 3.04 | 9.7 | 2.13 |
| 8 | 1 | 2 | 7 | 17 | 0 | 27 | 2.73 | 7.5 | 1.26 |
| 9 | 3 | 0 | 8 | 14 | 0 | 25 | 14.32 | 141.6 | 37.4 |
| 10 | 1 | 0 | 5 | 11 | 0 | 17 | 11.15 | 143.6 | 33.16 |
| 11 | 2 | 0 | 10 | 9 | 0 | 21 | 16.34 | 146.6 | 41.97 |
| 12 | 3 | 1 | 8 | 13 | 0 | 25 | 7.74 | 142.1 | 27.45 |
| 13 | 1 | 0 | 8 | 13 | 0 | 22 | 9.97 | 145.6 | 29.69 |
| 14 | 0 | 0 | 10 | 12 | 0 | 22 | 2.6 | 6.6 | 1.35 |
| 15 | 2 | 1 | 8 | 9 | 0 | 20 | 10.53 | 144.8 | 30.88 |
| 16 | 3 | 0 | 8 | 13 | 0 | 24 | 8.07 | 137.1 | 26.93 |
| 17 | 3 | 1 | 10 | 12 | 0 | 26 | 8.38 | 147.8 | 27.98 |
| 18 | 2 | 0 | 10 | 13 | 0 | 25 | 8.12 | 139.4 | 26.83 |
| 19 | 1 | 0 | 7 | 14 | 0 | 22 | 8.68 | 138.4 | 28.34 |
| 20 | 2 | 0 | 8 | 15 | 0 | 25 | 8.34 | 150.5 | 29.05 |



10.2.1 Bar graph: Dihedral violation statistics for each model



The mean and the standard deviation are shown in blue with respect to the y axis on the right

10.3 Violation statistics in the ensemble

Violation analysis may find that some restraints are violated in very few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of ensemble.

| N | umber | of vio | lated | restrair | its | Fraction of the ensemble | | |
|------|-------|--------|-------|----------|-------|--------------------------|------|--|
| CHI2 | CHI1 | PHI | PSI | CHI21 | Total | Count ¹ | % | |
| 1 | 3 | 15 | 13 | 0 | 32 | 1 | 5.0 | |
| 1 | 1 | 8 | 6 | 0 | 16 | 2 | 10.0 | |
| 1 | 0 | 3 | 7 | 0 | 11 | 3 | 15.0 | |
| 0 | 1 | 1 | 6 | 0 | 8 | 4 | 20.0 | |
| 0 | 0 | 4 | 2 | 0 | 6 | 5 | 25.0 | |
| 0 | 0 | 2 | 0 | 0 | 2 | 6 | 30.0 | |
| 1 | 0 | 4 | 1 | 0 | 6 | 7 | 35.0 | |
| 0 | 0 | 3 | 2 | 0 | 5 | 8 | 40.0 | |
| 1 | 0 | 2 | 2 | 0 | 5 | 9 | 45.0 | |
| 0 | 0 | 1 | 1 | 0 | 2 | 10 | 50.0 | |
| 0 | 0 | 1 | 3 | 0 | 4 | 11 | 55.0 | |
| 0 | 0 | 0 | 2 | 0 | 2 | 12 | 60.0 | |

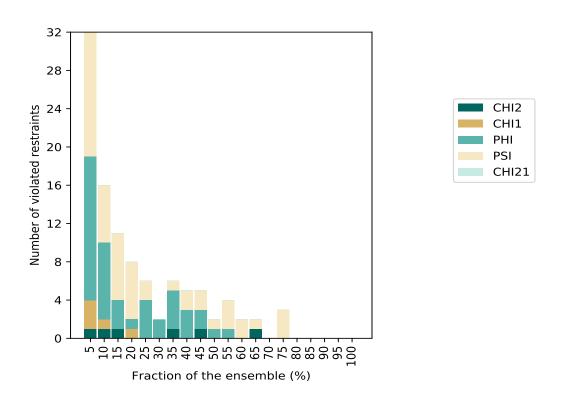


| Continued | trom | mmoninonic | maaa |
|----------------|------|------------|-------|
| COHABABACA | | DIEUIUU | DUIUE |
| 0 0 1000100000 | | | |

| N | umber | of vio | lated | restrair | ts | Fraction of the ensemble | | |
|------|-------|--------|-------|----------|---------------------|--------------------------|-------|--|
| CHI2 | CHI1 | PHI | PSI | CHI21 | Total | Count ¹ | % | |
| 1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 2 | 13 | 65.0 | |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 14 | 70.0 | |
| 0 | 0 | 0 | 3 | 0 | 3 | 15 | 75.0 | |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 16 | 80.0 | |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 17 | 85.0 | |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 18 | 90.0 | |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 19 | 95.0 | |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 20 | 100.0 | |

¹ Number of models with violations

10.3.1 Bar graph: Dihedral-anlge Violation statistics for the ensemble



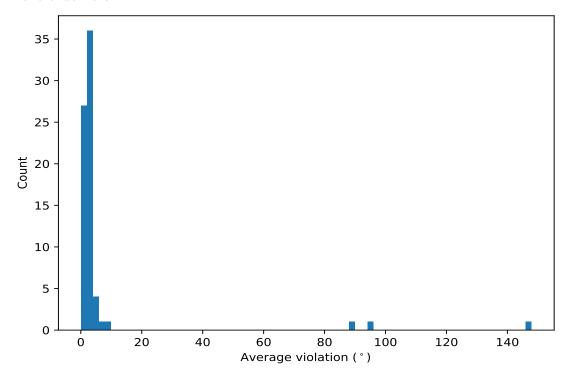
10.4 Most violated dihedral-anlge restraints

10.4.1 Histogram: Distribution of mean dihedral-anlge violations

The following histogram shows the distribution of the average value of the violation. The average is calculated for each restraint that is violated in more than one model over all the violated models



in the ensemble



10.4.2 Table: Most violated dihedral-angle restraints

The following table provides the mean and the standard deviation of the absolute value of the violation for each restraint sorted by number of violated models and the mean value. The Key (restraint list ID, restraint ID) is the unique identifier for a given restraint.

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | $Models^1$ | Mean (°) | \mathbf{SD}^2 (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|------------|----------|---------------------|
| (1,18) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:ASP:N | 8 | 8.95 | 1.34 |
| (1,14) | 1:A:8:PHE:N | 1:A:8:PHE:CA | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:THR:N | 10 | 5.23 | 2.64 |
| (1,175) | 1:A:133:PHE:N | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:C | 1:A:134:LYS:N | 15 | 6.63 | 1.04 |
| (1,16) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:ASP:N | 12 | 3.41 | 1.39 |
| (1,52) | 1:A:37:ARG:N | 1:A:37:ARG:CA | 1:A:37:ARG:C | 1:A:38:LYS:N | 9 | 2.92 | 1.02 |
| (1,22) | 1:A:12:GLU:N | 1:A:12:GLU:CA | 1:A:12:GLU:C | 1:A:13:LEU:N | 12 | 3.02 | 1.35 |
| (1,54) | 1:A:38:LYS:N | 1:A:38:LYS:CA | 1:A:38:LYS:C | 1:A:39:GLU:N | 7 | 2.99 | 0.9 |
| (1,86) | 1:A:84:ASP:N | 1:A:84:ASP:CA | 1:A:84:ASP:C | 1:A:85:ALA:N | 13 | 2.35 | 1.05 |
| (1,255) | 1:A:19:PRO:N | 1:A:19:PRO:CA | 1:A:19:PRO:C | 1:A:20:MET:N | 11 | 2.92 | 0.87 |
| (1,4) | 1:A:3:ILE:N | 1:A:3:ILE:CA | 1:A:3:ILE:C | 1:A:4:TYR:N | 9 | 2.46 | 0.89 |
| (1,251) | 1:A:181:CYS:N | 1:A:181:CYS:CA | 1:A:181:CYS:C | 1:A:182:LEU:N | 8 | 2.17 | 0.82 |
| (1,243) | 1:A:177:ILE:N | 1:A:177:ILE:CA | 1:A:177:ILE:C | 1:A:178:GLU:N | 11 | 2.44 | 0.81 |
| (1,230) | 1:A:170:MET:N | 1:A:170:MET:CA | 1:A:170:MET:C | 1:A:171:LEU:N | 15 | 2.29 | 0.7 |
| (1,183) | 1:A:137:ALA:N | 1:A:137:ALA:CA | 1:A:137:ALA:C | 1:A:138:PHE:N | 3 | 2.4 | 0.98 |
| (1,223) | 1:A:166:VAL:N | 1:A:166:VAL:CA | 1:A:166:VAL:C | 1:A:167:PRO:N | 4 | 2.4 | 0.78 |
| (1,167) | 1:A:128:LEU:N | 1:A:128:LEU:CA | 1:A:128:LEU:C | 1:A:129:ALA:N | 15 | 2.23 | 0.74 |
| (1,253) | 1:A:26:LEU:N | 1:A:26:LEU:CA | 1:A:26:LEU:C | 1:A:27:VAL:N | 11 | 2.22 | 0.6 |
| (1,24) | 1:A:14:SER:N | 1:A:14:SER:CA | 1:A:14:SER:C | 1:A:15:SER:N | 3 | 2.53 | 0.48 |
| (1,82) | 1:A:82:TYR:N | 1:A:82:TYR:CA | 1:A:82:TYR:C | 1:A:83:GLU:N | 3 | 2.13 | 0.66 |
| (1,38) | 1:A:29:GLU:N | 1:A:29:GLU:CA | 1:A:29:GLU:C | 1:A:30:PHE:N | 5 | 2.06 | 0.58 |



| | ed from previous pag | | | | | | |
|---------------|----------------------|----------------|----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | \mathbf{Models}^1 | Mean (°) | \mathbf{SD}^2 (°) |
| (1,224) | 1:A:167:PRO:N | 1:A:167:PRO:CA | 1:A:167:PRO:C | 1:A:168:THR:N | 3 | 2.27 | 0.69 |
| (1,40) | 1:A:30:PHE:N | 1:A:30:PHE:CA | 1:A:30:PHE:C | 1:A:31:LYS:N | 4 | 1.8 | 0.55 |
| (1,171) | 1:A:131:ASP:N | 1:A:131:ASP:CA | 1:A:131:ASP:C | 1:A:132:ARG:N | 4 | 1.95 | 0.44 |
| (1,70) | 1:A:74:HIS:N | 1:A:74:HIS:CA | 1:A:74:HIS:C | 1:A:75:LYS:N | 2 | 1.85 | 0.75 |
| (1,245) | 1:A:178:GLU:N | 1:A:178:GLU:CA | 1:A:178:GLU:C | 1:A:179:GLU:N | 2 | 2.1 | 0.4 |
| (1,249) | 1:A:180:LYS:N | 1:A:180:LYS:CA | 1:A:180:LYS:C | 1:A:181:CYS:N | 3 | 1.83 | 0.53 |
| (1,36) | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:GLU:N | 4 | 2.25 | 0.17 |
| (1,6) | 1:A:4:TYR:N | 1:A:4:TYR:CA | 1:A:4:TYR:C | 1:A:5:LYS:N | 3 | 1.73 | 0.42 |
| (1,2) | 1:A:2:LEU:N | 1:A:2:LEU:CA | 1:A:2:LEU:C | 1:A:3:ILE:N | 4 | 2.08 | 0.08 |
| (1,207) | 1:A:155:ILE:N | 1:A:155:ILE:CA | 1:A:155:ILE:C | 1:A:156:ILE:N | 2 | 2.2 | 0.0 |
| (1,199) | 1:A:146:GLU:N | 1:A:146:GLU:CA | 1:A:146:GLU:C | 1:A:147:GLY:N | 5 | 1.56 | 0.29 |
| (1,72) | 1:A:75:LYS:N | 1:A:75:LYS:CA | 1:A:75:LYS:C | 1:A:76:LEU:N | 3 | 1.43 | 0.4 |
| (1,247) | 1:A:179:GLU:N | 1:A:179:GLU:CA | 1:A:179:GLU:C | 1:A:180:LYS:N | 2 | 1.6 | 0.3 |
| (1,213) | 1:A:158:TYR:N | 1:A:158:TYR:CA | 1:A:158:TYR:C | 1:A:159:ARG:N | 2 | 1.55 | 0.35 |
| (1,78) | 1:A:79:MET:N | 1:A:79:MET:CA | 1:A:79:MET:C | 1:A:80:ASN:N | 4 | 1.5 | 0.25 |
| (1,169) | 1:A:130:LYS:N | 1:A:130:LYS:CA | 1:A:130:LYS:C | 1:A:131:ASP:N | 2 | 1.35 | 0.05 |
| (1,15) | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 6 | 5.87 | 2.11 |
| (1,13) | 1:A:7:ILE:C | 1:A:8:PHE:N | 1:A:8:PHE:CA | 1:A:8:PHE:C | 9 | 4.61 | 1.29 |
| (1,172) | 1:A:131:ASP:C | 1:A:132:ARG:N | 1:A:132:ARG:CA | 1:A:132:ARG:C | 9 | 2.7 | 1.26 |
| (1,21) | 1:A:11:ASP:C | 1:A:12:GLU:N | 1:A:12:GLU:CA | 1:A:12:GLU:C | 6 | 3.08 | 0.78 |
| (1,23) | 1:A:13:LEU:C | 1:A:14:SER:N | 1:A:14:SER:CA | 1:A:14:SER:C | 5 | 2.2 | 1.19 |
| (1,19) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:ASP:N | 1:A:11:ASP:CA | 1:A:11:ASP:C | 11 | 2.54 | 1.09 |
| (1,57) | 1:A:67:GLY:C | 1:A:68:ILE:N | 1:A:68:ILE:CA | 1:A:68:ILE:C | 8 | 2.2 | 0.85 |
| (1,180) | 1:A:135:ASN:C | 1:A:136:LEU:N | 1:A:136:LEU:CA | 1:A:136:LEU:C | 8 | 2.35 | 1.03 |
| (1,17) | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C | 5 | 2.32 | 0.98 |
| (1,35) | 1:A:27:VAL:C | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 10 | 2.42 | 0.86 |
| (1,77) | 1:A:78:GLU:C | 1:A:79:MET:N | 1:A:79:MET:CA | 1:A:79:MET:C | 7 | 1.93 | 0.77 |
| (1,5) | 1:A:3:ILE:C | 1:A:4:TYR:N | 1:A:4:TYR:CA | 1:A:4:TYR:C | 3 | 2.3 | 0.91 |
| (1,246) | 1:A:178:GLU:C | 1:A:179:GLU:N | 1:A:179:GLU:CA | 1:A:179:GLU:C | 2 | 2.95 | 0.25 |
| (1,214) | 1:A:159:ARG:C | 1:A:160:ASP:N | 1:A:160:ASP:CA | 1:A:160:ASP:C | 7 | 1.94 | 0.69 |
| (1,7) | 1:A:4:TYR:C | 1:A:5:LYS:N | 1:A:5:LYS:CA | 1:A:5:LYS:C | 2 | 2.1 | 1.0 |
| (1,25) | 1:A:19:PRO:C | 1:A:20:MET:N | 1:A:20:MET:CA | 1:A:20:MET:C | 4 | 2.45 | 0.35 |
| (1,3) | 1:A:2:LEU:C | 1:A:3:ILE:N | 1:A:3:ILE:CA | 1:A:3:ILE:C | 5 | 1.88 | 0.67 |
| (1,227) | 1:A:168:THR:C | 1:A:169:LEU:N | 1:A:169:LEU:CA | 1:A:169:LEU:C | 7 | 1.77 | 0.55 |
| (1,53) | 1:A:37:ARG:C | 1:A:38:LYS:N | 1:A:38:LYS:CA | 1:A:38:LYS:C | 7 | 1.97 | 0.66 |
| (1,55) | 1:A:65:GLU:C | 1:A:66:ARG:N | 1:A:66:ARG:CA | 1:A:66:ARG:C | 3 | 2.13 | 0.57 |
| (1,83) | 1:A:82:TYR:C | 1:A:83:GLU:N | 1:A:83:GLU:CA | 1:A:83:GLU:C | 8 | 1.86 | 0.39 |
| (1,222) | 1:A:165:GLU:C | 1:A:166:VAL:N | 1:A:166:VAL:CA | 1:A:166:VAL:C | 2 | 1.95 | 0.65 |
| (1,220) | 1:A:164:THR:C | 1:A:165:GLU:N | 1:A:165:GLU:CA | 1:A:165:GLU:C | 5 | 1.92 | 0.32 |
| (1,216) | 1:A:160:ASP:C | 1:A:161:VAL:N | 1:A:161:VAL:CA | 1:A:161:VAL:C | 2 | 1.8 | 0.7 |
| (1,129) | 1:A:105:LYS:C | 1:A:106:ASN:N | 1:A:106:ASN:CA | 1:A:106:ASN:C | 2 | 2.1 | 0.2 |
| (1,200) | 1:A:151:GLY:C | 1:A:152:GLN:N | 1:A:152:GLN:CA | 1:A:152:GLN:C | 2 | 1.85 | 0.25 |
| (1,51) | 1:A:36:VAL:C | 1:A:37:ARG:N | 1:A:37:ARG:CA | 1:A:37:ARG:C | 2 | 1.6 | 0.3 |
| (1,239) | 1:A:174:GLU:C | 1:A:175:ALA:N | 1:A:175:ALA:CA | 1:A:175:ALA:C | 2 | 1.35 | 0.05 |
| (1,252) | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:LEU:N | 1:A:26:LEU:CA | 1:A:26:LEU:C | 3 | 1.27 | 0.05 |
| (1,265) | 1:A:95:PHE:CA | 1:A:95:PHE:CB | 1:A:95:PHE:CG | 1:A:95:PHE:CD1 | 3 | 147.07 | 3.6 |
| (1,271) | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:CB | 1:A:133:PHE:CG | 1:A:133:PHE:CD1 | 13 | 88.85 | 67.11 |
| (1,293) | 1:A:30:PHE:CA | 1:A:30:PHE:CB | 1:A:30:PHE:CG | 1:A:30:PHE:CD1 | 9 | 95.31 | 66.17 |
| (1,275) | 1:A:91:TYR:CA | 1:A:91:TYR:CB | 1:A:91:TYR:CG | 1:A:91:TYR:CD1 | 2 | 1.8 | 0.7 |
| (1,279) | 1:A:82:TYR:CA | 1:A:82:TYR:CB | 1:A:82:TYR:CG | 1:A:82:TYR:CD1 | 7 | 1.6 | 0.36 |
| (1,270) | 1:A:133:PHE:N | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:CB | 1:A:133:PHE:CG | 4 | 4.1 | 0.44 |
| (, , , , , , | 1 | | | | 1 | 1. 1 | |



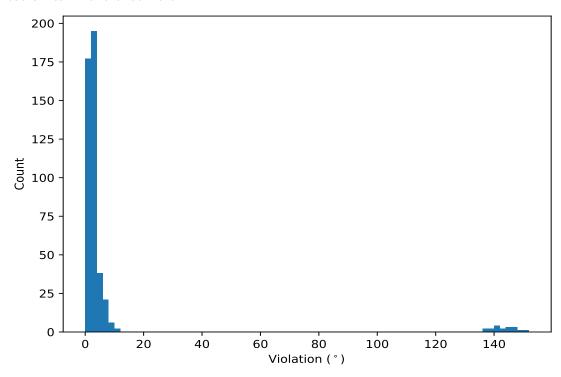
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | \mathbf{Models}^1 | Mean (°) | \mathbf{SD}^2 (°) |
|---------|--------------|---------------|---------------|---------------|---------------------|----------|---------------------|
| (1,274) | 1:A:91:TYR:N | 1:A:91:TYR:CA | 1:A:91:TYR:CB | 1:A:91:TYR:CG | 2 | 1.95 | 0.65 |

¹ Number of violated models, ²Standard deviation

10.5 All violated dihedral-angle restraints

10.5.1 Histogram: Distribution of violations

The following histogram shows the distribution of the absolute value of the violation for all violated restraints in the ensemble.



10.5.2 Table: All violated dihedral-angle restraints

The following table lists the absolute value of the violation for each restraint in the ensemble sorted by its value. The Key (restraint list ID, restraint ID) is the unique identifier for a given restraint.

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation $(^{\circ})$ |
|---------|----------------|----------------|----------------|-----------------|----------|------------------------|
| (1,265) | 1:A:95:PHE:CA | 1:A:95:PHE:CB | 1:A:95:PHE:CG | 1:A:95:PHE:CD1 | 20 | 150.5 |
| (1,265) | 1:A:95:PHE:CA | 1:A:95:PHE:CB | 1:A:95:PHE:CG | 1:A:95:PHE:CD1 | 5 | 148.6 |
| (1,281) | 1:A:116:PHE:CA | 1:A:116:PHE:CB | 1:A:116:PHE:CG | 1:A:116:PHE:CD1 | 17 | 147.8 |
| (1,271) | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:CB | 1:A:133:PHE:CG | 1:A:133:PHE:CD1 | 11 | 146.6 |
| (1,293) | 1:A:30:PHE:CA | 1:A:30:PHE:CB | 1:A:30:PHE:CG | 1:A:30:PHE:CD1 | 6 | 146.0 |
| (1,271) | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:CB | 1:A:133:PHE:CG | 1:A:133:PHE:CD1 | 13 | 145.6 |



| Key | ed from previous pag Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|-----------------------------|----------------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,271) | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:CB | 1:A:133:PHE:CG | 1:A:133:PHE:CD1 | 15 | 144.8 |
| (1,293) | 1:A:30:PHE:CA | 1:A:30:PHE:CB | 1:A:30:PHE:CG | 1:A:30:PHE:CD1 | 11 | 144.7 |
| (1,293) | 1:A:30:PHE:CA | 1:A:30:PHE:CB | 1:A:30:PHE:CG | 1:A:30:PHE:CD1 | 10 | 143.6 |
| (1,265) | 1:A:95:PHE:CA | 1:A:95:PHE:CB | 1:A:95:PHE:CG | 1:A:95:PHE:CD1 | 12 | 142.1 |
| (1,271) | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:CB | 1:A:133:PHE:CG | 1:A:133:PHE:CD1 | 9 | 141.6 |
| (1,271) | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:CB | 1:A:133:PHE:CG | 1:A:133:PHE:CD1 | 1 | 141.4 |
| (1,293) | 1:A:30:PHE:CA | 1:A:30:PHE:CB | 1:A:30:PHE:CG | 1:A:30:PHE:CD1 | 1 | 141.0 |
| (1,293) | 1:A:30:PHE:CA | 1:A:30:PHE:CB | 1:A:30:PHE:CG | 1:A:30:PHE:CD1 | 9 | 140.4 |
| (1,271) | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:CB | 1:A:133:PHE:CG | 1:A:133:PHE:CD1 | 18 | 139.4 |
| (1,271) | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:CB | 1:A:133:PHE:CG | 1:A:133:PHE:CD1 | 19 | 138.4 |
| (1,271) | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:CB | 1:A:133:PHE:CG | 1:A:133:PHE:CD1 | 16 | 137.1 |
| (1,293) | 1:A:30:PHE:CA | 1:A:30:PHE:CB | 1:A:30:PHE:CG | 1:A:30:PHE:CD1 | 2 | 136.7 |
| (1,18) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:ASP:N | 13 | 11.6 |
| (1,14) | 1:A:8:PHE:N | 1:A:8:PHE:CA | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:THR:N | 17 | 10.7 |
| (1,18) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:ASP:N | 4 | 9.7 |
| (1,18) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:ASP:N | 7 | 9.7 |
| (1,18) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:ASP:N | 15 | 9.2 |
| (1,18) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:ASP:N | 17 | 8.8 |
| (1,175) | 1:A:133:PHE:N | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:C | 1:A:134:LYS:N | 5 | 8.8 |
| (1,175) | 1:A:133:PHE:N | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:C | 1:A:134:LYS:N | 10 | 8.4 |
| (1,175) | 1:A:133:PHE:N | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:C | 1:A:134:LYS:N | 1 | 7.9 |
| (1,15) | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 9 | 7.8 |
| (1,18) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:ASP:N | 5 | 7.6 |
| (1,15) | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 15 | 7.6 |
| (1,18) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:ASP:N | 8 | 7.5 |
| (1,18) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:ASP:N | 9 | 7.5 |
| (1,14) | 1:A:8:PHE:N | 1:A:8:PHE:CA | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:THR:N | 15 | 7.5 |
| (1,175) | 1:A:133:PHE:N | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:C | 1:A:134:LYS:N | 18 | 7.0 |
| (1,175) | 1:A:133:PHE:N | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:C | 1:A:134:LYS:N | 11 | 6.9 |
| (1,15) | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 7 | 6.8 |
| (1,14) | 1:A:8:PHE:N | 1:A:8:PHE:CA | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:THR:N | 9 | 6.8 |
| (1,14) | 1:A:8:PHE:N | 1:A:8:PHE:CA | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:THR:N | 13 | 6.8 |
| (1,175) | 1:A:133:PHE:N | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:C | 1:A:134:LYS:N | 2 | 6.7 |
| (1,175) | 1:A:133:PHE:N | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:C | 1:A:134:LYS:N | 14 | 6.6 |
| (1,13) | 1:A:7:ILE:C | 1:A:8:PHE:N | 1:A:8:PHE:CA | 1:A:8:PHE:C | 2 | 6.5 |
| (1,175) | 1:A:133:PHE:N | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:C | 1:A:134:LYS:N | 6 | 6.4 |
| (1,13) | 1:A:7:ILE:C | 1:A:8:PHE:N | 1:A:8:PHE:CA | 1:A:8:PHE:C | 20 | 6.4 |
| (1,175) | 1:A:133:PHE:N | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:C | 1:A:134:LYS:N | 16 | 6.3 |
| (1,175) | 1:A:133:PHE:N | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:C | 1:A:134:LYS:N | 20 | 6.3 |
| (1,175) | 1:A:133:PHE:N | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:C | 1:A:134:LYS:N | 19 | 6.2 |
| (1,14) | 1:A:8:PHE:N | 1:A:8:PHE:CA | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:THR:N | 7 | 6.1 |
| (1,175) | 1:A:133:PHE:N | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:C | 1:A:134:LYS:N | 9 | 5.9 |
| (1,15) | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 17 | 5.9 |
| (1,175) | 1:A:133:PHE:N | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:C | 1:A:134:LYS:N | 13 | 5.8 |
| (1,13) | 1:A:7:ILE:C | 1:A:8:PHE:N | 1:A:8:PHE:CA | 1:A:8:PHE:C | 10 | 5.8 |
| (1,16) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:ASP:N | 1 | 5.7 |
| (1,15) | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 13 | 5.6 |
| (1,271) | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:CB | 1:A:133:PHE:CG | 1:A:133:PHE:CD1 | 12 | 5.5 |
| (1,175) | 1:A:133:PHE:N | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:C | 1:A:134:LYS:N | 7 | 5.5 |
| (1,16) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:ASP:N | 18 | 5.3 |
| (1,52) | 1:A:37:ARG:N | 1:A:37:ARG:CA | 1:A:37:ARG:C | 1:A:38:LYS:N | 13 | 5.1 |



| | ed from previous pag | | A 4 | A .i | M. LIID | T 7* .1 . 4 * (0) |
|---------|----------------------|----------------|----------------|-----------------|----------|--------------------------|
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
| (1,13) | 1:A:7:ILE:C | 1:A:8:PHE:N | 1:A:8:PHE:CA | 1:A:8:PHE:C | 11 | 5.1 |
| (1,22) | 1:A:12:GLU:N | 1:A:12:GLU:CA | 1:A:12:GLU:C | 1:A:13:LEU:N | 5 | 4.9 |
| (1,270) | 1:A:133:PHE:N | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:CB | 1:A:133:PHE:CG | 12 | 4.8 |
| (1,10) | 1:A:6:ASP:N | 1:A:6:ASP:CA | 1:A:6:ASP:C | 1:A:7:ILE:N | 6 | 4.8 |
| (1,86) | 1:A:84:ASP:N | 1:A:84:ASP:CA | 1:A:84:ASP:C | 1:A:85:ALA:N | 2 | 4.7 |
| (1,54) | 1:A:38:LYS:N | 1:A:38:LYS:CA | 1:A:38:LYS:C | 1:A:39:GLU:N | 18 | 4.7 |
| (1,22) | 1:A:12:GLU:N | 1:A:12:GLU:CA | 1:A:12:GLU:C | 1:A:13:LEU:N | 4 | 4.7 |
| (1,175) | 1:A:133:PHE:N | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:C | 1:A:134:LYS:N | 15 | 4.7 |
| (1,172) | 1:A:131:ASP:C | 1:A:132:ARG:N | 1:A:132:ARG:CA | 1:A:132:ARG:C | 19 | 4.6 |
| (1,23) | 1:A:13:LEU:C | 1:A:14:SER:N | 1:A:14:SER:CA | 1:A:14:SER:C | 7 | 4.5 |
| (1,21) | 1:A:11:ASP:C | 1:A:12:GLU:N | 1:A:12:GLU:CA | 1:A:12:GLU:C | 1 | 4.5 |
| (1,16) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:ASP:N | 14 | 4.5 |
| (1,271) | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:CB | 1:A:133:PHE:CG | 1:A:133:PHE:CD1 | 8 | 4.4 |
| (1,22) | 1:A:12:GLU:N | 1:A:12:GLU:CA | 1:A:12:GLU:C | 1:A:13:LEU:N | 15 | 4.4 |
| (1,19) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:ASP:N | 1:A:11:ASP:CA | 1:A:11:ASP:C | 7 | 4.4 |
| (1,19) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:ASP:N | 1:A:11:ASP:CA | 1:A:11:ASP:C | 15 | 4.3 |
| (1,172) | 1:A:131:ASP:C | 1:A:132:ARG:N | 1:A:132:ARG:CA | 1:A:132:ARG:C | 1 | 4.3 |
| (1,264) | 1:A:95:PHE:N | 1:A:95:PHE:CA | 1:A:95:PHE:CB | 1:A:95:PHE:CG | 8 | 4.2 |
| (1,255) | 1:A:19:PRO:N | 1:A:19:PRO:CA | 1:A:19:PRO:C | 1:A:20:MET:N | 4 | 4.2 |
| (1,22) | 1:A:12:GLU:N | 1:A:12:GLU:CA | 1:A:12:GLU:C | 1:A:13:LEU:N | 14 | 4.2 |
| (1,270) | 1:A:133:PHE:N | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:CB | 1:A:133:PHE:CG | 8 | 4.1 |
| (1,255) | 1:A:19:PRO:N | 1:A:19:PRO:CA | 1:A:19:PRO:C | 1:A:20:MET:N | 20 | 4.1 |
| (1,16) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:ASP:N | 12 | 4.1 |
| (1,13) | 1:A:7:ILE:C | 1:A:8:PHE:N | 1:A:8:PHE:CA | 1:A:8:PHE:C | 3 | 4.1 |
| (1,52) | 1:A:37:ARG:N | 1:A:37:ARG:CA | 1:A:37:ARG:C | 1:A:38:LYS:N | 7 | 4.0 |
| (1,4) | 1:A:3:ILE:N | 1:A:3:ILE:CA | 1:A:3:ILE:C | 1:A:4:TYR:N | 16 | 4.0 |
| (1,255) | 1:A:19:PRO:N | 1:A:19:PRO:CA | 1:A:19:PRO:C | 1:A:20:MET:N | 19 | 4.0 |
| (1,16) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:ASP:N | 8 | 4.0 |
| (1,86) | 1:A:84:ASP:N | 1:A:84:ASP:CA | 1:A:84:ASP:C | 1:A:85:ALA:N | 4 | 3.9 |
| (1,57) | 1:A:67:GLY:C | 1:A:68:ILE:N | 1:A:68:ILE:CA | 1:A:68:ILE:C | 10 | 3.9 |
| (1,270) | 1:A:133:PHE:N | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:CB | 1:A:133:PHE:CG | 4 | 3.9 |
| (1,172) | 1:A:131:ASP:C | 1:A:132:ARG:N | 1:A:132:ARG:CA | 1:A:132:ARG:C | 9 | 3.9 |
| (1,16) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:ASP:N | 19 | 3.9 |
| (1,13) | 1:A:7:ILE:C | 1:A:8:PHE:N | 1:A:8:PHE:CA | 1:A:8:PHE:C | 14 | 3.9 |
| (1,251) | 1:A:181:CYS:N | 1:A:181:CYS:CA | 1:A:181:CYS:C | 1:A:182:LEU:N | 14 | 3.8 |
| (1,243) | 1:A:177:ILE:N | 1:A:177:ILE:CA | 1:A:177:ILE:C | 1:A:178:GLU:N | 17 | 3.8 |
| (1,230) | 1:A:170:MET:N | 1:A:170:MET:CA | 1:A:170:MET:C | 1:A:171:LEU:N | 11 | 3.8 |
| (1,19) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:ASP:N | 1:A:11:ASP:CA | 1:A:11:ASP:C | 9 | 3.8 |
| (1,180) | 1:A:135:ASN:C | 1:A:136:LEU:N | 1:A:136:LEU:CA | 1:A:136:LEU:C | 6 | 3.8 |
| (1,180) | 1:A:135:ASN:C | 1:A:136:LEU:N | 1:A:136:LEU:CA | 1:A:136:LEU:C | 13 | 3.8 |
| (1,14) | 1:A:8:PHE:N | 1:A:8:PHE:CA | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:THR:N | 4 | 3.8 |
| (1,86) | 1:A:84:ASP:N | 1:A:84:ASP:CA | 1:A:84:ASP:C | 1:A:85:ALA:N | 19 | 3.7 |
| (1,4) | 1:A:3:ILE:N | 1:A:3:ILE:CA | 1:A:3:ILE:C | 1:A:4:TYR:N | 11 | 3.7 |
| (1,230) | 1:A:170:MET:N | 1:A:170:MET:CA | 1:A:170:MET:C | 1:A:171:LEU:N | 7 | 3.7 |
| (1,22) | 1:A:12:GLU:N | 1:A:12:GLU:CA | 1:A:12:GLU:C | 1:A:13:LEU:N | 16 | 3.7 |
| (1,17) | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C | 14 | 3.7 |
| (1,54) | 1:A:38:LYS:N | 1:A:38:LYS:CA | 1:A:38:LYS:C | 1:A:39:GLU:N | 10 | 3.6 |
| (1,35) | 1:A:27:VAL:C | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 18 | 3.6 |
| (1,271) | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:CB | 1:A:133:PHE:CG | 1:A:133:PHE:CD1 | 3 | 3.6 |
| (1,270) | 1:A:133:PHE:N | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:CB | 1:A:133:PHE:CG | 17 | 3.6 |
| (1,243) | 1:A:177:ILE:N | 1:A:177:ILE:CA | 1:A:177:ILE:C | 1:A:178:GLU:N | 18 | 3.6 |
| | | | | 1 | | d on next page |



| (1,22) | | ed from previous pag | | | | | |
|--|---------|----------------------|----------------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,121 | Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
| (1,183 | , , | | | | | | |
| (1,27) | · · / | | | | | | |
| (1,223) 1:A-166-VAL-N | (, , | | | | | | |
| | (, , | | | | | | |
| (1,243) | / | | | | | | |
| (1,167) | · · / | | | | | | |
| (1,13) | · · / | | | | | | |
| (1,55 1-A3-3ILEC 1-A-4-TYRN 1-A-4-TYRCA 1-A-4-TYRC 9 3.3 (1,35 1-A27-VALC 1-A-28-TYRN 1-A-28-TYRCA 1-A-28-TYRC 3 3.3 (1,35 1-A-27-VALC 1-A-28-TYRN 1-A-28-TYRCA 1-A-28-TYRC 13 3.3 (1,255 1-A-19-PRO 1-A-19 | (1,167) | 1:A:128:LEU:N | 1:A:128:LEU:CA | 1:A:128:LEU:C | 1:A:129:ALA:N | 19 | 3.4 |
| (1,35) | (1,13) | | | 1:A:8:PHE:CA | | 16 | |
| 1,355 | (1,5) | | | | | | |
| (1,255) 1:A:19-PRO:N | (1,35) | | | | | | |
| (1,180 | (1,35) | 1:A:27:VAL:C | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 13 | 3.3 |
| (1,167) 1:A:128:LEU:N 1:A:128:LEU:CA 1:A:128:LEU:C 1:A:129:ALA:N 9 3.3 (1,13) 1:A:7:ILE:C 1:A:8:PHE:N 1:A:8:PHE:CA 1:A:8:PHE:C 1 3.3 (1,54) 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:C 1:A:39:GUI:N 12 3.2 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 9 3.2 (1,24) 1:A:17:GUIC 1:A:17:GUIC 1:A:17:GUIC 20 3.2 (1,24) 1:A:17:GUIC 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 1:A:17:GUIC 20 3.2 (1,230) 1:A:13:ASP:C 1:A:13:2ARG:N 1:A:13:2ARG:CA 1:A:17:MET:C 1:A:17:LEU:N 2 3.2 (1,17) 1:A:13:ASP:C 1:A:35:LYS:N 1:A:22:LEU:C 3.2:LEU:CA 1:A:22:LEU:CA 3.2:LEU:CA 1:A:22:LEU:CA 3.2:LEU:CA 3.2:LEU:CA 3.3:A:33:LEU:CA 3.3:A: | (1,255) | 1:A:19:PRO:N | 1:A:19:PRO:CA | 1:A:19:PRO:C | 1:A:20:MET:N | 18 | 3.3 |
| 1.13 | (1,180) | 1:A:135:ASN:C | 1:A:136:LEU:N | 1:A:136:LEU:CA | 1:A:136:LEU:C | 9 | 3.3 |
| (1,54) | (1,167) | 1:A:128:LEU:N | 1:A:128:LEU:CA | 1:A:128:LEU:C | 1:A:129:ALA:N | 9 | 3.3 |
| (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 9 3.2 (1,246) 1:A:178:GU:C 1:A:179:GU:CA 1:A:179:GU:C 20 3.2 (1,246) 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:170:MET:C 1:A:170:MET:N 13 3.2 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:132:ARG:N 1:A:132:ARG:CA 1:A:132:ARG:CA 1:A:313:ARG:C 11 3.2 (1,1) 1:A:1:MET:C 1:A:2:LEU:N 1:A:2:LEU:CA 1:A:3:LYS:C 8 3.1 (1,52) 1:A:3:7:ARG:N 1:A:3:7:ARG:CA 1:A:3:7:ARG:C 1:A:3:3:PHE:CB 3.1 (1,52) 1:A:3:7:ARG:N 1:A:3:7:ARG:CA 1:A:3:3:PHE:CB 1:A:13:3:PHE:CB 1:A:13:3:PHE:CB 1:A:13:3:PHE:CB 1:A:13:3:PHE:CB 1:A:13:3:PHE:CB 1:A:13:3:PHE:CB 1:A:13:3:PHE:CB 1:A:16:A:13:AB 9 3.1 (1,22) 1:A:13:3:PHE:CB 1:A:13:A:16:AB 1:A:13:AB 9 3.1 (1,22) 1:A:13:AB 1:A:13:AB 1:A:13:AB 9 | (1,13) | 1:A:7:ILE:C | 1:A:8:PHE:N | 1:A:8:PHE:CA | 1:A:8:PHE:C | 1 | 3.3 |
| (1,246) 1:A:178:GLU:C 1:A:179:GLU:N 1:A:179:GLU:C 20 3.2 (1,240) 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 1:A:15:SER:N 13 3.2 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:171:LEU:N 2 3.2 (1,172) 1:A:13:IASP:C 1:A:13:2ARG:N 1:A:13:2ARG:CA 1:A:13:2ARG:C 11 3.2 (1,17) 1:A:4:TYR:C 1:A:2:LEU:N 1:A:2:LEU:CA 1:A:3:2ARG:C 1 3.2 (1,7) 1:A:4:TYR:C 1:A:2:LYS:N 1:A:3:2HS:CA 1:A:3:2HS:C 8 3.1 (1,52) 1:A:3:7:ARG:N 1:A:3:7:ARG:CA 1:A:3:7:ARG:C 1:A:3:3:IYS:N 10 3.1 (1,52) 1:A:3:3:PHE:CA 1:A:13:3:PHE:CB | (1,54) | 1:A:38:LYS:N | 1:A:38:LYS:CA | 1:A:38:LYS:C | 1:A:39:GLU:N | 12 | 3.2 |
| (1,24) 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 1:A:15:SER:N 13 3.2 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:171:LEU:N 2 3.2 (1,17) 1:A:131:ASP:C 1:A:22:LEU:N 1:A:22:LEU:CA 1:A:32:ARG:C 11 3.2 (1,7) 1:A:4:TYR:C 1:A:25:LYS:N 1:A:25:LYS:CA 1:A:35:LYS:C 8 3.1 (1,52) 1:A:37:ARG:N 1:A:37:ARG:CA 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 10 3.1 (1,52) 1:A:37:ARG:N 1:A:37:ARG:CA 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 18 3.1 (1,52) 1:A:37:ARG:N 1:A:37:ARG:CA 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 18 3.1 (1,52) 1:A:133:PHE:CB 1:A:133:PHE:CB 1:A:133:PHE:CB 1:A:133:PHE:CB 1:A:133:PHE:CB 1:A:133:PHE:CD 17 3.1 (1,22) 1:A:12:A:12:GLU:N 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:CB 1:A:13:GLU:CB 1:A:13:GLU:CB 1:A:13:GLU:CB 1:A:13:GLU:CB 1:A:13:GLU:CB 1:A:13:GLU:CB 1:A | (1,253) | 1:A:26:LEU:N | 1:A:26:LEU:CA | 1:A:26:LEU:C | 1:A:27:VAL:N | 9 | 3.2 |
| (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:171:LEU:N 2 3.2 (1,172) 1:A:131:ASP:C 1:A:132:ARG:N 1:A:132:ARG:CA 1:A:132:ARG:C 11 3.2 (1,1) 1:A:1:MET:C 1:A:32:LEU:CA 1:A:2:LEU:C 3 3.2 (1,1) 1:A:1:MET:C 1:A:35:LYS:N 1:A:3:LYS:N 1:A:3:LYS:N 10 3.1 (1,52) 1:A:37:ARG:N 1:A:37:ARG:CA 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 10 3.1 (1,52) 1:A:37:ARG:N 1:A:37:ARG:CA 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 10 3.1 (1,52) 1:A:33:PEC:CA 1:A:133:PHE:CB 1:A:133:PHE:CB 1:A:133:PHE:CD 17 3.1 (1,271) 1:A:12:GLU:N 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:C 1:A:13:LEU:N 9 3.1 (1,214) 1:A:15:PS:ARG:C 1:A:130:LYS:CA 1:A:16:CASP:C 19 3.1 (1,168) 1:A:13:THR:N 1:A:29:THR:CA 1:A:29:THR:CA 1:A:39:THR:CA 1:A:30:LYS:CA 1:A:130:LYS:C 11 | (1,246) | 1:A:178:GLU:C | 1:A:179:GLU:N | 1:A:179:GLU:CA | 1:A:179:GLU:C | 20 | 3.2 |
| (1,172) 1:A:131:ASP:C 1:A:132:ARG:N 1:A:132:ARG:CA 1:A:132:ARG:C 11 3.2 (1,1) 1:A:1:MET:C 1:A:2:LEU:N 1:A:2:LEU:CA 1:A:2:LEU:C 3 3.2 (1,7) 1:A:4:TYR:C 1:A:3:TYS:N 1:A:5:LYS:CA 1:A:5:LYS:C 8 3.1 (1,52) 1:A:37:ARG:N 1:A:37:ARG:CA 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 10 3.1 (1,52) 1:A:37:ARG:N 1:A:37:ARG:CA 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 18 3.1 (1,52) 1:A:33:PHE:CA 1:A:133:PHE:CB 1:A:133:PHE:CD1 17 3.1 (1,22) 1:A:12:GLU:N 1:A:133:PHE:CB 1:A:133:PHE:CD1 17 3.1 (1,22) 1:A:14:2:GLU:N 1:A:16:ASP:DC 1:A:13:LEU:N 9 3.1 (1,22) 1:A:14:2:GLU:N 1:A:16:ASP:DC 1:A:13:LEU:N 9 3.1 (1,24) 1:A:13:SARG:C 1:A:16:ASP:DC 1:A:13:LEU:N 9 3.1 (1,25) 1:A:38:LYS:N 1:A:29:THR:CB 1:A:13:LEU:N 9 <td>(1,24)</td> <td>1:A:14:SER:N</td> <td>1:A:14:SER:CA</td> <td>1:A:14:SER:C</td> <td>1:A:15:SER:N</td> <td>13</td> <td>3.2</td> | (1,24) | 1:A:14:SER:N | 1:A:14:SER:CA | 1:A:14:SER:C | 1:A:15:SER:N | 13 | 3.2 |
| (1,1) 1:A:1:MET:C 1:A:2:LEU:N 1:A:2:LEU:CA 1:A:2:LEU:C 3 3.2 (1,7) 1:A:4:TYR:C 1:A:5:LYS:N 1:A:5:LYS:CA 1:A:5:LYS:C 8 3.1 (1,52) 1:A:37:ARG:N 1:A:37:ARG:CA 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 10 3.1 (1,52) 1:A:33:ARG:N 1:A:37:ARG:CA 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 18 3.1 (1,27) 1:A:133:PHE:CA 1:A:133:PHE:CB 1:A:133:PHE:CG 1:A:133:PHE:CD1 17 3.1 (1,22) 1:A:12:GLU:N 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:C 1:A:13:LEU:N 9 3.1 (1,24) 1:A:159:ARG:C 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C 19 3.1 (1,168) 1:A:2:19:ARG:C 1:A:130:LYS:N 1:A:130:LYS:CA 1:A:130:LYS:C 11 3.1 (1,168) 1:A:2:1PR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:38:LYS:C 1:A:38:LYS:C 1:A:33:GLU:N 10 3.0 (1,54) 1:A:3:3:LS:N 1:A:3:3:LS:C 1:A:38:LYS:C 1:A:39:GLU:N 10 3.0 | (1,230) | 1:A:170:MET:N | 1:A:170:MET:CA | 1:A:170:MET:C | 1:A:171:LEU:N | 2 | 3.2 |
| (1,7) 1:A:4:TYR:C 1:A:5:LYS:N 1:A:5:LYS:CA 1:A:5:LYS:C 8 3.1 (1,52) 1:A:37:ARG:N 1:A:37:ARG:CA 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 10 3.1 (1,52) 1:A:37:ARG:N 1:A:37:ARG:CA 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 18 3.1 (1,27) 1:A:133:PHE:CA 1:A:133:PHE:CB 1:A:133:PHE:CD 1:A:133:PHE:CD 1:A:33:PHE:CD 1:A:33:PHE:CD 1.7 3.1 (1,21) 1:A:12:GLU:N 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:C 1:A:13:LEU:N 9 3.1 (1,214) 1:A:12:GLU:N 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C 19 3.1 (1,16) 1:A:21:PARG:C 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C 11 3.1 (1,82) 1:A:32:TYR:N 1:A:32:TYR:CA 1:A:38:LYS:C 1:A:33:GLU:N 10 3.0 (1,54) 1:A:34:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:228:TYR:C 1:A:39:GLU:N 16 3.0 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:228:TYR:C | (1,172) | 1:A:131:ASP:C | 1:A:132:ARG:N | 1:A:132:ARG:CA | 1:A:132:ARG:C | 11 | 3.2 |
| (1,52) 1:A:37:ARG:N 1:A:37:ARG:CA 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 10 3.1 (1,52) 1:A:37:ARG:N 1:A:37:ARG:CA 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 18 3.1 (1,52) 1:A:37:ARG:N 1:A:37:ARG:CA 1:A:33:PHE:CG 1:A:38:LYS:N 18 3.1 (1,271) 1:A:133:PHE:CA 1:A:133:PHE:CB 1:A:133:PHE:CG 1:A:133:PHE:CD1 17 3.1 (1,22) 1:A:12:GU:N 1:A:12:GU:CA 1:A:13:EU:N 9 3.1 (1,24) 1:A:15:PARG:C 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:CD 19 3.1 (1,168) 1:A:29:ALA:C 1:A:130:LYS:N 1:A:130:LYS:CA 1:A:130:LYS:C 11 3.1 (1,16) 1:A:9:THR:N 1:A:29:THR:CA 1:A:38:LYS:C 1:A:33:GLU:N 10 3.0 (1,54) 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:C 1:A:39:GLU:N 10 3.0 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 1:A:39:GLU:N 16 3.0 | (1,1) | 1:A:1:MET:C | 1:A:2:LEU:N | 1:A:2:LEU:CA | 1:A:2:LEU:C | 3 | 3.2 |
| (1,52) 1:A:37:ARG:N 1:A:37:ARG:CA 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 18 3.1 (1,271) 1:A:133:PHE:CA 1:A:133:PHE:CB 1:A:133:PHE:CB 1:A:133:PHE:CD 17 3.1 (1,22) 1:A:12:GLU:N 1:A:12:GLU:CA 1:A:133:PHE:CB 1:A:133:PHE:CD 17 3.1 (1,214) 1:A:159:ARG:C 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C 19 3.1 (1,168) 1:A:129:ALA:C 1:A:130:LYS:N 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:N 3 3.1 (1,166) 1:A:9:THR:N 1:A:29:THR:CA 1:A:49:THR:C 1:A:10:ASP:N 3 3.1 (1,36) 1:A:38:ZYR:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:JYS:C 1:A:38:GU:N 10 3.0 (1,54) 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:C 1:A:38:GU:N 10 3.0 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:C 1:A:38:GU:N 16 3.0 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:33:ILE:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 6 < | (1,7) | 1:A:4:TYR:C | 1:A:5:LYS:N | 1:A:5:LYS:CA | 1:A:5:LYS:C | 8 | 3.1 |
| (1,271) 1:A:133:PHE:CA 1:A:133:PHE:CB 1:A:133:PHE:CG 1:A:133:PHE:CD1 17 3.1 (1,22) 1:A:12:GLU:N 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:C 1:A:13:LEU:N 9 3.1 (1,214) 1:A:159:ARG:C 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C 19 3.1 (1,168) 1:A:129:ALA:C 1:A:130:LYS:N 1:A:130:LYS:CA 1:A:130:LYS:C 11 3.1 (1,16) 1:A:9:THR:N 1:A:29:THR:CA 1:A:49:THR:C 1:A:130:LYS:C 11 3.1 (1,82) 1:A:38:LYS:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:38:GLU:N 10 3.0 (1,54) 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:C 1:A:39:GLU:N 16 3.0 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 8 3.0 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:33:ILE:N 1:A:31ILE:CA 1:A:28:TYR:C 8 3.0 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:33:ILE:CA 1:A:31ILE:CA 1:A:31ILE:CA 1:A:28:TYR:C 8 <th< td=""><td>(1,52)</td><td>1:A:37:ARG:N</td><td>1:A:37:ARG:CA</td><td>1:A:37:ARG:C</td><td>1:A:38:LYS:N</td><td>10</td><td>3.1</td></th<> | (1,52) | 1:A:37:ARG:N | 1:A:37:ARG:CA | 1:A:37:ARG:C | 1:A:38:LYS:N | 10 | 3.1 |
| (1,22) 1:A:12:GLU:N 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:C 1:A:13:LEU:N 9 3.1 (1,214) 1:A:159:ARG:C 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C 19 3.1 (1,168) 1:A:129:ALA:C 1:A:130:LYS:N 1:A:130:LYS:CA 1:A:130:LYS:C 11 3.1 (1,16) 1:A:9:THR:N 1:A:9:THR:CA 1:A:9:THR:C 1:A:10:ASP:N 3 3.1 (1,82) 1:A:82:TYR:N 1:A:82:TYR:CA 1:A:82:TYR:C 1:A:33:GLU:N 10 3.0 (1,54) 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:C 1:A:39:GLU:N 16 3.0 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 8 3.0 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 5 3.0 (1,35) 1:A:27:PRO:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 8 3.0 (1,31) 1:A:219:PRO:N 1:A:219:PRO:CA 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 5 3.0 | (1,52) | 1:A:37:ARG:N | 1:A:37:ARG:CA | 1:A:37:ARG:C | 1:A:38:LYS:N | 18 | 3.1 |
| (1,214) 1:A:159:ARG:C 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C 19 3.1 (1,168) 1:A:129:ALA:C 1:A:130:LYS:N 1:A:130:LYS:CA 1:A:130:LYS:C 11 3.1 (1,16) 1:A:9:THR:N 1:A:9:THR:CA 1:A:9:THR:C 1:A:10:ASP:N 3 3.1 (1,82) 1:A:82:TYR:N 1:A:82:TYR:CA 1:A:82:TYR:C 1:A:38:GU:N 10 3.0 (1,54) 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:C 1:A:39:GU:N 16 3.0 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 6 3.0 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:3:IE:C 6 3.0 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 8 3.0 (1,3) 1:A:21:GLU:C 1:A:3:ILE:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:3:ILE:C 5 3.0 (1,25) 1:A:19:PRO:N 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:CA 1:A:20:MET:N 13 | (1,271) | 1:A:133:PHE:CA | 1:A:133:PHE:CB | 1:A:133:PHE:CG | 1:A:133:PHE:CD1 | 17 | 3.1 |
| (1,168) 1:A:129:ALA:C 1:A:130:LYS:N 1:A:130:LYS:CA 1:A:130:LYS:C 11 3.1 (1,16) 1:A:9:THR:N 1:A:9:THR:CA 1:A:9:THR:C 1:A:10:ASP:N 3 3.1 (1,82) 1:A:82:TYR:N 1:A:82:TYR:CA 1:A:82:TYR:C 1:A:33:GLU:N 10 3.0 (1,54) 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:C 1:A:39:GLU:N 16 3.0 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 6 3.0 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 8 3.0 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 5 3.0 (1,255) 1:A:19:PRO:C 1:A:19:PRO:CA 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 13 3.0 (1,255) 1:A:19:PRO:C 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:20:MET:C 20 3.0 (1,25) 1:A:19:PRO:C 1:A:12:GLU:CA 1:A:20:MET:CA 1:A:20:MET:C 20 3.0 </td <td>(1,22)</td> <td>1:A:12:GLU:N</td> <td>1:A:12:GLU:CA</td> <td>1:A:12:GLU:C</td> <td>1:A:13:LEU:N</td> <td>9</td> <td>3.1</td> | (1,22) | 1:A:12:GLU:N | 1:A:12:GLU:CA | 1:A:12:GLU:C | 1:A:13:LEU:N | 9 | 3.1 |
| (1,16) 1:A:9:THR:N 1:A:9:THR:CA 1:A:9:THR:C 1:A:10:ASP:N 3 3.1 (1,82) 1:A:82:TYR:N 1:A:82:TYR:CA 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 10 3.0 (1,54) 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:C 1:A:39:GLU:N 16 3.0 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 6 3.0 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 8 3.0 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 8 3.0 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:28:TYR:C 8 3.0 (1,35) 1:A:19:PRO:C 1:A:19:PRO:CA 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 13 3.0 (1,255) 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:CA 1:A:20:MET:C 20 3.0 (1,253) 1:A:21:PRO:C 1:A:20:MET:CA 1:A:20:MET:CA 1:A:4:20:MET:CC 20 3.0 (1,21)< | · · / | 1:A:159:ARG:C | 1:A:160:ASP:N | 1:A:160:ASP:CA | 1:A:160:ASP:C | 19 | 3.1 |
| (1,16) 1:A:9:THR:N 1:A:9:THR:CA 1:A:9:THR:C 1:A:10:ASP:N 3 3.1 (1,82) 1:A:82:TYR:N 1:A:82:TYR:CA 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 10 3.0 (1,54) 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:C 1:A:39:GLU:N 16 3.0 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 6 3.0 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 8 3.0 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 8 3.0 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 8 3.0 (1,35) 1:A:19:PRO:C 1:A:3:ILE:CA 1:A:20:MET:N 13 3.0 (1,255) 1:A:19:PRO:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:20:MET:N 3 3.0 (1,253) 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:CA 1:A:20:MET:CA 1:A:20:MET:CA 2.0 3.0 (1,25) 1:A:11:A:29:FR | (1,168) | 1:A:129:ALA:C | 1:A:130:LYS:N | 1:A:130:LYS:CA | 1:A:130:LYS:C | 11 | 3.1 |
| (1,82) 1:A:82:TYR:N 1:A:82:TYR:CA 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 10 3.0 (1,54) 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:C 1:A:39:GLU:N 16 3.0 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 6 3.0 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:3:ILE:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 8 3.0 (1,3) 1:A:21:EU:C 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:28:TYR:C 8 3.0 (1,255) 1:A:19:PRO:N 1:A:19:PRO:CA 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 13 3.0 (1,253) 1:A:19:PRO:C 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:20:MET:CA 20 3.0 (1,25) 1:A:19:PRO:C 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:C 2 3.0 (1,21) 1:A:11:ASP:C 1:A:12:GLU:N 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:C 2 3.0 (1,167) 1:A:12:B:LEU:N 1:A:29:THR:CA 1:A:4:19:THR:N 4 3.0 (1,16 | (1,16) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:ASP:N | 3 | 3.1 |
| (1,54) 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:C 1:A:39:GLU:N 16 3.0 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 6 3.0 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 8 3.0 (1,3) 1:A:2:LEU:C 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 5 3.0 (1,255) 1:A:19:PRO:N 1:A:19:PRO:CA 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 13 3.0 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:20:MET:CA 1:A:20:MET:C 20 3.0 (1,25) 1:A:19:PRO:C 1:A:12:GLU:CA 1:A:20:MET:CA 1:A:12:GLU:C 2 3.0 (1,21) 1:A:11:ASP:C 1:A:12:GLU:N 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:C 2 3.0 (1,16) 1:A:3:HE:N 1:A:3:PHE:CA 1:A:3:PHE:C 1:A:12:GLU:CA 1:A:3:PHE:C 1:A:3:PHE:C 1:A:3:PHE:C 1:A:3:PHE:C 1:A:3:PHE:C 1:A:3:G:PHE:C 1:A:3:G:PHE:C 1:A:3:G:P | · · / | 1:A:82:TYR:N | 1:A:82:TYR:CA | 1:A:82:TYR:C | | 10 | 3.0 |
| (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 8 3.0 (1,3) 1:A:2:LEU:C 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 5 3.0 (1,255) 1:A:19:PRO:N 1:A:19:PRO:CA 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 13 3.0 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 3 3.0 (1,25) 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 1:A:20:MET:C 20 3.0 (1,25) 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:CA 1:A:20:MET:C 20 3.0 (1,25) 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:CA 1:A:20:MET:C 20 3.0 (1,21) 1:A:11:ASP:C 1:A:12:GLU:N 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:C 2 3.0 (1,16) 1:A:128:LEU:N 1:A:128:LEU:CA 1:A:129:THR:C 1:A:10:ASP:N 6 3.0 (1,14) 1:A:38:PHE:N 1:A:38:PHE:C 1:A:39:THR:N 8 3.0 (1,33) 1:A:7:ILE:C 1:A:38:PHE:N 1:A:38:PHE:C | (1,54) | 1:A:38:LYS:N | 1:A:38:LYS:CA | 1:A:38:LYS:C | 1:A:39:GLU:N | 16 | 3.0 |
| (1,3) 1:A:2:LEU:C 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 5 3.0 (1,255) 1:A:19:PRO:N 1:A:19:PRO:CA 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 13 3.0 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 3 3.0 (1,25) 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 1:A:20:MET:CA 1:A:20:MET:C 20 3.0 (1,21) 1:A:11:ASP:C 1:A:12:GLU:N 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:C 2 3.0 (1,21) 1:A:11:ASP:C 1:A:12:GLU:N 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:C 2 3.0 (1,21) 1:A:11:ASP:C 1:A:12:GLU:N 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:C 2 3.0 (1,21) 1:A:11:ASP:C 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:C 2 3.0 (1,21) 1:A:14:ASP:C 1:A:14:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:CA 1:A:14:10:ASP:N 6 3.0 (1,16) 1:A:25:GLU:N 1: | (1,35) | 1:A:27:VAL:C | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 6 | 3.0 |
| (1,3) 1:A:2:LEU:C 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 5 3.0 (1,255) 1:A:19:PRO:N 1:A:19:PRO:CA 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 13 3.0 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 3 3.0 (1,25) 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 1:A:20:MET:CA 1:A:20:MET:C 20 3.0 (1,21) 1:A:11:ASP:C 1:A:12:GLU:N 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:C 2 3.0 (1,21) 1:A:11:ASP:C 1:A:12:GLU:N 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:C 2 3.0 (1,21) 1:A:11:ASP:C 1:A:12:GLU:N 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:C 2 3.0 (1,21) 1:A:11:ASP:C 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:C 2 3.0 (1,21) 1:A:14:ASP:C 1:A:14:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:CA 1:A:14:10:ASP:N 6 3.0 (1,16) 1:A:25:GLU:N 1: | (1,35) | 1:A:27:VAL:C | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 8 | 3.0 |
| (1,255) 1:A:19:PRO:N 1:A:19:PRO:CA 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 13 3.0 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 3 3.0 (1,25) 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 1:A:20:MET:CA 1:A:20:MET:C 20 3.0 (1,21) 1:A:11:ASP:C 1:A:12:GLU:N 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:C 2 3.0 (1,167) 1:A:128:LEU:N 1:A:128:LEU:CA 1:A:128:LEU:C 1:A:129:ALA:N 4 3.0 (1,16) 1:A:9:THR:N 1:A:9:THR:CA 1:A:9:THR:C 1:A:10:ASP:N 6 3.0 (1,14) 1:A:8:PHE:N 1:A:8:PHE:C 1:A:9:THR:N 8 3.0 (1,13) 1:A:7:ILE:C 1:A:8:PHE:N 1:A:8:PHE:CA 1:A:8:PHE:C 18 3.0 (1,53) 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:C 16 2.9 (1,4) 1:A:33:ILE:N 1:A:29:GLU:CA 1:A:29:GLU:C 1:A:4:4:TYR:N 10 2.9 (1,253) | | | | | | | |
| (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 3 3.0 (1,25) 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 1:A:20:MET:CA 1:A:20:MET:C 20 3.0 (1,21) 1:A:11:ASP:C 1:A:12:GLU:N 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:C 2 3.0 (1,167) 1:A:128:LEU:N 1:A:128:LEU:CA 1:A:128:LEU:C 1:A:129:ALA:N 4 3.0 (1,16) 1:A:9:THR:N 1:A:9:THR:CA 1:A:9:THR:C 1:A:10:ASP:N 6 3.0 (1,14) 1:A:8:PHE:N 1:A:8:PHE:C 1:A:9:THR:N 8 3.0 (1,13) 1:A:7:ILE:C 1:A:8:PHE:N 1:A:8:PHE:CA 1:A:8:PHE:C 18 3.0 (1,53) 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:C 16 2.9 (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 1:A:4:TYR:N 10 2.9 (1,38) 1:A:29:GLU:N 1:A:29:GLU:CA 1:A:29:GLU:C 1:A:30:PHE:N 11 2.9 (1,253) | (' / | 1:A:19:PRO:N | 1:A:19:PRO:CA | 1:A:19:PRO:C | 1:A:20:MET:N | 13 | 3.0 |
| (1,25) 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 1:A:20:MET:CA 1:A:20:MET:C 20 3.0 (1,21) 1:A:11:ASP:C 1:A:12:GLU:N 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:C 2 3.0 (1,167) 1:A:128:LEU:N 1:A:128:LEU:CA 1:A:128:LEU:C 1:A:129:ALA:N 4 3.0 (1,16) 1:A:9:THR:N 1:A:9:THR:CA 1:A:9:THR:C 1:A:10:ASP:N 6 3.0 (1,14) 1:A:8:PHE:N 1:A:8:PHE:CA 1:A:9:THR:N 8 3.0 (1,13) 1:A:7:ILE:C 1:A:8:PHE:N 1:A:8:PHE:CA 1:A:8:PHE:C 18 3.0 (1,53) 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:C 16 2.9 (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 1:A:4:TYR:N 10 2.9 (1,38) 1:A:29:GLU:N 1:A:29:GLU:CA 1:A:29:GLU:C 1:A:30:PHE:N 11 2.9 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 6 2.9 (1,227) | · · / | | | | | | |
| (1,21) 1:A:11:ASP:C 1:A:12:GLU:N 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:C 2 3.0 (1,167) 1:A:128:LEU:N 1:A:128:LEU:CA 1:A:128:LEU:C 1:A:129:ALA:N 4 3.0 (1,16) 1:A:9:THR:N 1:A:9:THR:CA 1:A:9:THR:C 1:A:10:ASP:N 6 3.0 (1,14) 1:A:8:PHE:N 1:A:8:PHE:C 1:A:9:THR:N 8 3.0 (1,13) 1:A:7:ILE:C 1:A:8:PHE:N 1:A:8:PHE:CA 1:A:8:PHE:C 18 3.0 (1,53) 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:C 16 2.9 (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 1:A:4:TYR:N 10 2.9 (1,38) 1:A:29:GLU:N 1:A:29:GLU:CA 1:A:29:GLU:C 1:A:30:PHE:N 11 2.9 (1,253) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 6 2.9 (1,224) 1:A:167:PRO:N 1:A:167:PRO:CA 1:A:167:PRO:C 1:A:168:THR:N 16 2.9 <td>(, ,</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td>20</td> <td></td> | (, , | | | | | 20 | |
| (1,167) 1:A:128:LEU:N 1:A:128:LEU:CA 1:A:128:LEU:C 1:A:129:ALA:N 4 3.0 (1,16) 1:A:9:THR:N 1:A:9:THR:CA 1:A:9:THR:C 1:A:10:ASP:N 6 3.0 (1,14) 1:A:8:PHE:N 1:A:8:PHE:C 1:A:9:THR:N 8 3.0 (1,13) 1:A:7:ILE:C 1:A:8:PHE:N 1:A:8:PHE:CA 1:A:8:PHE:C 18 3.0 (1,53) 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:C 16 2.9 (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 1:A:4:TYR:N 10 2.9 (1,38) 1:A:29:GLU:N 1:A:29:GLU:CA 1:A:29:GLU:C 1:A:30:PHE:N 11 2.9 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 16 2.9 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:168:THR:N 16 2.9 (1,224) 1:A:167:PRO:N 1:A:167:PRO:CA 1:A:168:THR:N 16 2.9 | (/ / | | | | | | |
| (1,16) 1:A:9:THR:N 1:A:9:THR:CA 1:A:9:THR:C 1:A:10:ASP:N 6 3.0 (1,14) 1:A:8:PHE:N 1:A:8:PHE:CA 1:A:8:PHE:C 1:A:9:THR:N 8 3.0 (1,13) 1:A:7:ILE:C 1:A:8:PHE:N 1:A:8:PHE:CA 1:A:8:PHE:C 18 3.0 (1,53) 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:C 16 2.9 (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 1:A:4:TYR:N 10 2.9 (1,38) 1:A:29:GLU:N 1:A:29:GLU:CA 1:A:29:GLU:C 1:A:30:PHE:N 11 2.9 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 16 2.9 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:167:PRO:C 1:A:168:THR:N 16 2.9 (1,224) 1:A:167:PRO:N 1:A:167:PRO:CA 1:A:167:PRO:C 1:A:168:THR:N 16 2.9 | (/ / | | | | | | |
| (1,14) 1:A:8:PHE:N 1:A:8:PHE:CA 1:A:8:PHE:C 1:A:9:THR:N 8 3.0 (1,13) 1:A:7:ILE:C 1:A:8:PHE:N 1:A:8:PHE:CA 1:A:8:PHE:C 18 3.0 (1,53) 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:C 16 2.9 (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 1:A:4:TYR:N 10 2.9 (1,38) 1:A:29:GLU:N 1:A:29:GLU:CA 1:A:29:GLU:C 1:A:30:PHE:N 11 2.9 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 16 2.9 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:168:THR:N 16 2.9 (1,224) 1:A:167:PRO:N 1:A:167:PRO:CA 1:A:168:THR:N 16 2.9 | , | | | | | 6 | |
| (1,13) 1:A:7:ILE:C 1:A:8:PHE:N 1:A:8:PHE:CA 1:A:8:PHE:C 18 3.0 (1,53) 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:C 16 2.9 (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 1:A:4:TYR:N 10 2.9 (1,38) 1:A:29:GLU:N 1:A:29:GLU:CA 1:A:29:GLU:C 1:A:30:PHE:N 11 2.9 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 16 2.9 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 6 2.9 (1,224) 1:A:167:PRO:N 1:A:167:PRO:CA 1:A:167:PRO:C 1:A:168:THR:N 16 2.9 | , | | | | | | |
| (1,53) 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:C 16 2.9 (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 1:A:4:TYR:N 10 2.9 (1,38) 1:A:29:GLU:N 1:A:29:GLU:CA 1:A:29:GLU:C 1:A:30:PHE:N 11 2.9 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 16 2.9 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 6 2.9 (1,224) 1:A:167:PRO:N 1:A:167:PRO:CA 1:A:167:PRO:C 1:A:168:THR:N 16 2.9 | , | | | | | | |
| (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 1:A:4:TYR:N 10 2.9 (1,38) 1:A:29:GLU:N 1:A:29:GLU:CA 1:A:29:GLU:C 1:A:30:PHE:N 11 2.9 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 16 2.9 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 6 2.9 (1,224) 1:A:167:PRO:N 1:A:167:PRO:CA 1:A:167:PRO:C 1:A:168:THR:N 16 2.9 | , | | | | | | |
| (1,38) 1:A:29:GLU:N 1:A:29:GLU:CA 1:A:29:GLU:C 1:A:30:PHE:N 11 2.9 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 16 2.9 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 6 2.9 (1,224) 1:A:167:PRO:N 1:A:167:PRO:CA 1:A:167:PRO:C 1:A:168:THR:N 16 2.9 | , | | | | | | |
| (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 16 2.9 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 6 2.9 (1,224) 1:A:167:PRO:N 1:A:167:PRO:CA 1:A:167:PRO:C 1:A:168:THR:N 16 2.9 | (' ' | | | | | | |
| (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 6 2.9 (1,224) 1:A:167:PRO:N 1:A:167:PRO:CA 1:A:167:PRO:C 1:A:168:THR:N 16 2.9 | · · / | | | | | | |
| (1,224) 1:A:167:PRO:N 1:A:167:PRO:CA 1:A:167:PRO:C 1:A:168:THR:N 16 2.9 | · · / | | | | | | |
| | , , | | | | | | |
| (A_1) $= A_2$ $= A_3$ $= A_4$ $= A_$ | (1,214) | 1:A:159:ARG:C | 1:A:160:ASP:N | 1:A:160:ASP:CA | 1:A:160:ASP:C | 8 | 2.9 |



| | ed from previous pag | | | | | |
|-------------------|----------------------|------------------|----------------|----------------|----------|----------------|
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
| (1,167) | 1:A:128:LEU:N | 1:A:128:LEU:CA | 1:A:128:LEU:C | 1:A:129:ALA:N | 7 | 2.9 |
| (1,167) | 1:A:128:LEU:N | 1:A:128:LEU:CA | 1:A:128:LEU:C | 1:A:129:ALA:N | 8 | 2.9 |
| (1,16) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:ASP:N | 20 | 2.9 |
| (1,86) | 1:A:84:ASP:N | 1:A:84:ASP:CA | 1:A:84:ASP:C | 1:A:85:ALA:N | 9 | 2.8 |
| (1,57) | 1:A:67:GLY:C | 1:A:68:ILE:N | 1:A:68:ILE:CA | 1:A:68:ILE:C | 15 | 2.8 |
| (1,55) | 1:A:65:GLU:C | 1:A:66:ARG:N | 1:A:66:ARG:CA | 1:A:66:ARG:C | 20 | 2.8 |
| (1,255) | 1:A:19:PRO:N | 1:A:19:PRO:CA | 1:A:19:PRO:C | 1:A:20:MET:N | 17 | 2.8 |
| (1,251) | 1:A:181:CYS:N | 1:A:181:CYS:CA | 1:A:181:CYS:C | 1:A:182:LEU:N | 5 | 2.8 |
| (1,21) | 1:A:11:ASP:C | 1:A:12:GLU:N | 1:A:12:GLU:CA | 1:A:12:GLU:C | 3 | 2.8 |
| (1,17) | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C | 18 | 2.8 |
| (1,77) | 1:A:78:GLU:C | 1:A:79:MET:N | 1:A:79:MET:CA | 1:A:79:MET:C | 6 | 2.7 |
| (1,53) | 1:A:37:ARG:C | 1:A:38:LYS:N | 1:A:38:LYS:CA | 1:A:38:LYS:C | 3 | 2.7 |
| (1,40) | 1:A:30:PHE:N | 1:A:30:PHE:CA | 1:A:30:PHE:C | 1:A:31:LYS:N | 1 | 2.7 |
| (1,255) | 1:A:19:PRO:N | 1:A:19:PRO:CA | 1:A:19:PRO:C | 1:A:20:MET:N | 9 | 2.7 |
| (1,246) | 1:A:178:GLU:C | 1:A:179:GLU:N | 1:A:179:GLU:CA | 1:A:179:GLU:C | 6 | 2.7 |
| (1,17) | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C | 1 | 2.7 |
| (1,14) | 1:A:8:PHE:N | 1:A:8:PHE:CA | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:THR:N | 18 | 2.7 |
| (1,83) | 1:A:82:TYR:C | 1:A:83:GLU:N | 1:A:83:GLU:CA | 1:A:83:GLU:C | 18 | 2.6 |
| (1,70) | 1:A:74:HIS:N | 1:A:74:HIS:CA | 1:A:74:HIS:C | 1:A:75:LYS:N | 12 | 2.6 |
| (1,52) | 1:A:37:ARG:N | 1:A:37:ARG:CA | 1:A:37:ARG:C | 1:A:38:LYS:N | 2 | 2.6 |
| (1,4) | 1:A:3:ILE:N | 1:A:3:ILE:CA | 1:A:3:ILE:C | 1:A:4:TYR:N | 12 | 2.6 |
| (1,274) | 1:A:91:TYR:N | 1:A:91:TYR:CA | 1:A:91:TYR:CB | 1:A:91:TYR:CG | 7 | 2.6 |
| (1,255) | 1:A:19:PRO:N | 1:A:19:PRO:CA | 1:A:19:PRO:C | 1:A:20:MET:N | 15 | 2.6 |
| (1,253) | 1:A:26:LEU:N | 1:A:26:LEU:CA | 1:A:26:LEU:C | 1:A:27:VAL:N | 8 | 2.6 |
| (1,243) | 1:A:177:ILE:N | 1:A:177:ILE:CA | 1:A:177:ILE:C | 1:A:178:GLU:N | 10 | 2.6 |
| (1,224) | 1:A:167:PRO:N | 1:A:167:PRO:CA | 1:A:167:PRO:C | 1:A:168:THR:N | 4 | 2.6 |
| (1,222) | 1:A:165:GLU:C | 1:A:166:VAL:N | 1:A:166:VAL:CA | 1:A:166:VAL:C | 5 | 2.6 |
| (1,171) | 1:A:131:ASP:N | 1:A:131:ASP:CA | 1:A:131:ASP:C | 1:A:132:ARG:N | 11 | 2.6 |
| (1,14) | 1:A:8:PHE:N | 1:A:8:PHE:CA | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:THR:N | 6 | 2.6 |
| (1,57) | 1:A:67:GLY:C | 1:A:68:ILE:N | 1:A:68:ILE:CA | 1:A:68:ILE:C | 14 | 2.5 |
| (1,57) | 1:A:67:GLY:C | 1:A:68:ILE:N | 1:A:68:ILE:CA | 1:A:68:ILE:C | 18 | 2.5 |
| (1,52) | 1:A:37:ARG:N | 1:A:37:ARG:CA | 1:A:37:ARG:C | 1:A:38:LYS:N | 5 | 2.5 |
| (1,5) | 1:A:3:ILE:C | 1:A:4:TYR:N | 1:A:4:TYR:CA | 1:A:4:TYR:C | 18 | 2.5 |
| (1,38) | 1:A:29:GLU:N | 1:A:29:GLU:CA | 1:A:29:GLU:C | 1:A:30:PHE:N | 1 | 2.5 |
| | 1:A:30:PHE:CA | 1:A:30:PHE:CB | | 1:A:30:PHE:CD1 | 16 | 2.5 |
| (1,275) | 1:A:91:TYR:CA | 1:A:91:TYR:CB | 1:A:91:TYR:CG | 1:A:91:TYR:CD1 | 20 | 2.5 |
| (1,251) | 1:A:181:CYS:N | 1:A:181:CYS:CA | 1:A:181:CYS:C | 1:A:182:LEU:N | 9 | 2.5 |
| (1,25) | 1:A:19:PRO:C | 1:A:20:MET:N | 1:A:20:MET:CA | 1:A:20:MET:C | 6 | 2.5 |
| (1,249) | 1:A:180:LYS:N | 1:A:180:LYS:CA | 1:A:180:LYS:C | 1:A:181:CYS:N | 2 | 2.5 |
| (1,245) | 1:A:178:GLU:N | 1:A:178:GLU:CA | 1:A:178:GLU:C | 1:A:179:GLU:N | 2 | 2.5 |
| (1,213) $(1,223)$ | 1:A:166:VAL:N | 1:A:166:VAL:CA | 1:A:166:VAL:C | 1:A:167:PRO:N | 3 | 2.5 |
| (1,220) $(1,220)$ | 1:A:164:THR:C | 1:A:165:GLU:N | 1:A:165:GLU:CA | 1:A:165:GLU:C | 8 | 2.5 |
| (1,216) | 1:A:160:ASP:C | 1:A:161:VAL:N | 1:A:161:VAL:CA | 1:A:161:VAL:C | 11 | 2.5 |
| (1,210) $(1,21)$ | 1:A:11:ASP:C | 1:A:12:GLU:N | 1:A:12:GLU:CA | 1:A:12:GLU:C | 16 | 2.5 |
| (1,172) | 1:A:131:ASP:C | 1:A:132:ARG:N | 1:A:132:ARG:CA | 1:A:132:ARG:C | 15 | 2.5 |
| (1,167) | 1:A:128:LEU:N | 1:A:128:LEU:CA | 1:A:128:LEU:C | 1:A:129:ALA:N | 2 | 2.5 |
| (1,107) $(1,84)$ | 1:A:83:GLU:N | 1:A:83:GLU:CA | 1:A:83:GLU:C | 1:A:84:ASP:N | 14 | 2.4 |
| (1,54) $(1,54)$ | 1:A:38:LYS:N | 1:A:38:LYS:CA | 1:A:38:LYS:C | 1:A:39:GLU:N | 8 | 2.4 |
| (1,34) $(1,43)$ | 1:A:32:GLY:C | 1:A:33:LYS:N | 1:A:33:LYS:CA | 1:A:33:LYS:C | 8 | 2.4 |
| (1,36) | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:GLU:N | 3 | 2.4 |
| (1,36) $(1,36)$ | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:GLU:N | 16 | 2.4 |
| (1,00) | 1.11.20.1111.11 | 1.11.20.1 11t.OA | 1.11.20.1111.0 | 1.11.43.GLU.IN | | d on nert nage |



| | ed from previous pag | | | | 1 | |
|---------|----------------------|----------------|----------------|----------------|----------|----------------|
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
| (1,251) | 1:A:181:CYS:N | 1:A:181:CYS:CA | 1:A:181:CYS:C | 1:A:182:LEU:N | 6 | 2.4 |
| (1,243) | 1:A:177:ILE:N | 1:A:177:ILE:CA | 1:A:177:ILE:C | 1:A:178:GLU:N | 16 | 2.4 |
| (1,230) | 1:A:170:MET:N | 1:A:170:MET:CA | 1:A:170:MET:C | 1:A:171:LEU:N | 9 | 2.4 |
| (1,230) | 1:A:170:MET:N | 1:A:170:MET:CA | 1:A:170:MET:C | 1:A:171:LEU:N | 18 | 2.4 |
| (1,202) | 1:A:152:GLN:C | 1:A:153:VAL:N | 1:A:153:VAL:CA | 1:A:153:VAL:C | 15 | 2.4 |
| (1,19) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:ASP:N | 1:A:11:ASP:CA | 1:A:11:ASP:C | 8 | 2.4 |
| (1,19) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:ASP:N | 1:A:11:ASP:CA | 1:A:11:ASP:C | 17 | 2.4 |
| (1,183) | 1:A:137:ALA:N | 1:A:137:ALA:CA | 1:A:137:ALA:C | 1:A:138:PHE:N | 9 | 2.4 |
| (1,167) | 1:A:128:LEU:N | 1:A:128:LEU:CA | 1:A:128:LEU:C | 1:A:129:ALA:N | 20 | 2.4 |
| (1,9) | 1:A:5:LYS:C | 1:A:6:ASP:N | 1:A:6:ASP:CA | 1:A:6:ASP:C | 16 | 2.3 |
| (1,83) | 1:A:82:TYR:C | 1:A:83:GLU:N | 1:A:83:GLU:CA | 1:A:83:GLU:C | 14 | 2.3 |
| (1,6) | 1:A:4:TYR:N | 1:A:4:TYR:CA | 1:A:4:TYR:C | 1:A:5:LYS:N | 19 | 2.3 |
| (1,53) | 1:A:37:ARG:C | 1:A:38:LYS:N | 1:A:38:LYS:CA | 1:A:38:LYS:C | 7 | 2.3 |
| (1,52) | 1:A:37:ARG:N | 1:A:37:ARG:CA | 1:A:37:ARG:C | 1:A:38:LYS:N | 1 | 2.3 |
| (1,50) | 1:A:36:VAL:N | 1:A:36:VAL:CA | 1:A:36:VAL:C | 1:A:37:ARG:N | 3 | 2.3 |
| (1,3) | 1:A:2:LEU:C | 1:A:3:ILE:N | 1:A:3:ILE:CA | 1:A:3:ILE:C | 13 | 2.3 |
| (1,253) | 1:A:26:LEU:N | 1:A:26:LEU:CA | 1:A:26:LEU:C | 1:A:27:VAL:N | 13 | 2.3 |
| (1,243) | 1:A:177:ILE:N | 1:A:177:ILE:CA | 1:A:177:ILE:C | 1:A:178:GLU:N | 8 | 2.3 |
| (1,24) | 1:A:14:SER:N | 1:A:14:SER:CA | 1:A:14:SER:C | 1:A:15:SER:N | 6 | 2.3 |
| (1,230) | 1:A:170:MET:N | 1:A:170:MET:CA | 1:A:170:MET:C | 1:A:171:LEU:N | 12 | 2.3 |
| (1,223) | 1:A:166:VAL:N | 1:A:166:VAL:CA | 1:A:166:VAL:C | 1:A:167:PRO:N | 6 | 2.3 |
| (1,19) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:ASP:N | 1:A:11:ASP:CA | 1:A:11:ASP:C | 19 | 2.3 |
| (1,14) | 1:A:8:PHE:N | 1:A:8:PHE:CA | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:THR:N | 5 | 2.3 |
| (1,129) | 1:A:105:LYS:C | 1:A:106:ASN:N | 1:A:106:ASN:CA | 1:A:106:ASN:C | 15 | 2.3 |
| (1,86) | 1:A:84:ASP:N | 1:A:84:ASP:CA | 1:A:84:ASP:C | 1:A:85:ALA:N | 8 | 2.2 |
| (1,86) | 1:A:84:ASP:N | 1:A:84:ASP:CA | 1:A:84:ASP:C | 1:A:85:ALA:N | 14 | 2.2 |
| (1,55) | 1:A:65:GLU:C | 1:A:66:ARG:N | 1:A:66:ARG:CA | 1:A:66:ARG:C | 13 | 2.2 |
| (1,4) | 1:A:3:ILE:N | 1:A:3:ILE:CA | 1:A:3:ILE:C | 1:A:4:TYR:N | 8 | 2.2 |
| (1,36) | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 1:A:29:GLU:N | 15 | 2.2 |
| (1,25) | 1:A:19:PRO:C | 1:A:20:MET:N | 1:A:20:MET:CA | 1:A:20:MET:C | 5 | 2.2 |
| (1,230) | 1:A:170:MET:N | 1:A:170:MET:CA | 1:A:170:MET:C | 1:A:171:LEU:N | 8 | 2.2 |
| (1,22) | 1:A:12:GLU:N | 1:A:12:GLU:CA | 1:A:12:GLU:C | 1:A:13:LEU:N | 8 | 2.2 |
| (1,207) | 1:A:155:ILE:N | 1:A:155:ILE:CA | 1:A:155:ILE:C | 1:A:156:ILE:N | 11 | 2.2 |
| (1,207) | 1:A:155:ILE:N | 1:A:155:ILE:CA | 1:A:155:ILE:C | 1:A:156:ILE:N | 12 | 2.2 |
| (1,2) | 1:A:2:LEU:N | 1:A:2:LEU:CA | 1:A:2:LEU:C | 1:A:3:ILE:N | 14 | 2.2 |
| (1,19) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:ASP:N | 1:A:11:ASP:CA | 1:A:11:ASP:C | 5 | 2.2 |
| (1,54) | 1:A:38:LYS:N | 1:A:38:LYS:CA | 1:A:38:LYS:C | 1:A:39:GLU:N | 3 | 2.1 |
| (1,53) | 1:A:37:ARG:C | 1:A:38:LYS:N | 1:A:38:LYS:CA | 1:A:38:LYS:C | 10 | 2.1 |
| (1,52) | 1:A:37:ARG:N | 1:A:37:ARG:CA | 1:A:37:ARG:C | 1:A:38:LYS:N | 12 | 2.1 |
| (1,279) | 1:A:82:TYR:CA | 1:A:82:TYR:CB | 1:A:82:TYR:CG | 1:A:82:TYR:CD1 | 15 | 2.1 |
| (1,253) | 1:A:26:LEU:N | 1:A:26:LEU:CA | 1:A:26:LEU:C | 1:A:27:VAL:N | 6 | 2.1 |
| (1,25) | 1:A:19:PRO:C | 1:A:20:MET:N | 1:A:20:MET:CA | 1:A:20:MET:C | 2 | 2.1 |
| (1,243) | 1:A:177:ILE:N | 1:A:177:ILE:CA | 1:A:177:ILE:C | 1:A:178:GLU:N | 9 | 2.1 |
| (1,24) | 1:A:14:SER:N | 1:A:14:SER:CA | 1:A:14:SER:C | 1:A:15:SER:N | 17 | 2.1 |
| (1,230) | 1:A:170:MET:N | 1:A:170:MET:CA | 1:A:170:MET:C | 1:A:171:LEU:N | 13 | 2.1 |
| (1,227) | 1:A:168:THR:C | 1:A:169:LEU:N | 1:A:169:LEU:CA | 1:A:169:LEU:C | 9 | 2.1 |
| (1,21) | 1:A:11:ASP:C | 1:A:12:GLU:N | 1:A:12:GLU:CA | 1:A:12:GLU:C | 19 | 2.1 |
| (1,200) | 1:A:151:GLY:C | 1:A:152:GLN:N | 1:A:152:GLN:CA | 1:A:152:GLN:C | 11 | 2.1 |
| (1,2) | 1:A:2:LEU:N | 1:A:2:LEU:CA | 1:A:2:LEU:C | 1:A:3:ILE:N | 19 | 2.1 |
| (1,171) | 1:A:131:ASP:N | 1:A:131:ASP:CA | 1:A:131:ASP:C | 1:A:132:ARG:N | 1 | 2.1 |
| (1,167) | 1:A:128:LEU:N | 1:A:128:LEU:CA | 1:A:128:LEU:C | 1:A:129:ALA:N | 13 | 2.1 |
| ()) | | | | , | | d on nert nage |



| (1.82) | | ed from previous pag | | A 4 2 | A 4 4 | M-J-LTD | T 7:-1-4: (0) |
|--|---------|----------------------|----------------|----------------|---------------|---------|----------------------|
| (1.8) | - | | | | | | Violation (°) |
| (1,42) | (' / | | | | | | |
| (1,4) | (, , | | | | | | |
| (1.43 | · · / | | | | | | |
| 1,36 | (' / | | | | | | |
| 1.36 | · · / | | | | | | |
| (1,35) | (' / | | | | | | |
| (1,279) | (' / | | l l | | | | |
| (1,243) I.A:177:ILEN | (' / | | | | | | |
| (1,243) 1:A:177:ILE:N 1:A:177:ILE:CA 1:A:177:ILE:CA 1:A:177:ILE:N 7 2.0 | (' / | | | | | | |
| (1,230) 1.A.170.MET.N 1.A.170.MET.CA 1.A.170.MET.C 1.A.171.LEU.N 5 2.0 (1,220) 1.A.164.THR.C 1.A.165.GLU.N 1.A.165.GLU.N 1.A.165.GLU.C 4 2.0 (1,2) 1.A.21.LEU.N 1.A.21.LEU.CA 1.A.21.LEU.C 1.A.31.LE.N 8 2.0 (1,2) 1.A.21.LEU.N 1.A.21.LEU.CA 1.A.21.LEU.C 1.A.31.LE.N 8 2.0 (1,199) 1.A.146.GLU.N 1.A.166.GU.CA 1.A.12.LEU.C 1.A.31.LE.N 8 2.0 (1,199) 1.A.146.GLU.N 1.A.166.GU.CA 1.A.12.LEU.C 1.A.131.LE.N 20 2.0 (1,167) 1.A.10.ASP.C 1.A.11.ASP.N 1.A.11.ASP.CA 1.A.11.ASP.CA 1.A.11.ASP.C 13 2.0 (1,167) 1.A.12.LEU.N 1.A.12.LEU.CA 1.A.12.LEU.CC 1.A.12.9.ALA.N 1 2.0 (1,167) 1.A.12.LEU.N 1.A.12.LEU.CA 1.A.12.LEU.CC 1.A.12.9.ALA.N 1 2.0 (1,167) 1.A.12.LEU.CA 1.A.12.LEU.CA 1.A.12.LEU.CC 1.A.12.9.ALA.N 1 2.0 (1,167) 1.A.12.LEU.CC 1.A.12.HEU.CA 1.A.12.LEU.CC 1.A.12.9.ALA.N 1 2.0 (1,167) 1.A.12.LEU.CC 1.A.12.HEU.CA 1.A.12.LEU.CA 1.A.12.LEU.CC 1.A.12.HEU.CC 1.A.1 | (, , | | | | | | |
| (1,20) 1:A:164-THRC | (, , | | | | | | |
| (1,2) | · · / | | | | | | |
| (1,2) | · · / | | | | | | |
| (1,199) 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:146:GLU:C 1:A:147:GLY:N 20 2.0 (1,199) 1:A:10:ASP:C 1:A:11:ASP:CA 1:A:11:ASP:CA 1:A:11:ASP:CB 13 2.0 (1,167) 1:A:128:LEU:N 1:A:128:LEU:CA 1:A:128:LEU:C 1:A:129:ALA:N 1 2.0 (1,167) 1:A:128:LEU:N 1:A:128:LEU:CA 1:A:128:LEU:C 1:A:129:ALA:N 1 2.0 (1,83) 1:A:28:LEU:C 1:A:38:GLU:C 1:A:38:GU:C 5 1.9 (1,77) 1:A:78:GLU:C 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:38:GU:C 1:A:49:MET:CA (1,57) 1:A:67:GLY:C 1:A:36:MELE:N 1:A:68:ILE:CA 1:A:48:ILE:CA 1:A:38:GU:N 20 1.9 (1,51) 1:A:36:VAL.C 1:A:38:IVS:CA 1:A:38:IVS:C 1:A:38:GU:N 20 1.9 (1,51) 1:A:36:VAL.C 1:A:37:ARG:CA 1:A:37:ARG:CA 1:A:39:FGU:N 1:A:19:PRO:N 1:A:19:PRO:CA 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 7 1.9 (1,253) 1:A:16:LEU:N | , , | | | | | | |
| (1,19) 1:A:10:ASP:C 1:A:11:ASP:N 1:A:11:ASP:CA 1:A:11:ASP:C 13 2.0 (1,167) 1:A:128:LEU:N 1:A:128:LEU:CA 1:A:128:LEU:C 1:A:129:ALA:N 1 2.0 (1,167) 1:A:128:LEU:N 1:A:128:LEU:CA 1:A:129:ALA:N 11 2.0 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GU:C 5 1.9 (1,77) 1:A:67:GLU:C 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:79:MET:C 1:C 1.9 (1,57) 1:A:67:GLU:C 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:C 1:A:36:GLU:N 20 1.9 (1,54) 1:A:33:AYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:39:PRO:CA 1:A:39:PRO:CA 1:A:39:PRO:CA 1:A:39:PRO:CB 1:A:19:PRO:CB 1:A:20:MET:N 7 1.9 | , , | | | | | | |
| (1,167) 1:A:128:LEU:N 1:A:128:LEU:CA 1:A:128:LEU:C 1:A:129:ALA:N 1 2.0 (1,167) 1:A:128:LEU:N 1:A:128:LEU:CA 1:A:128:LEU:C 1:A:129:ALA:N 1 2.0 (1,77) 1:A:32:LU:C 1:A:39:MET:N 1:A:39:MET:CA 1:A:38:GLU:C 5 1.9 (1,57) 1:A:63:GLU:C 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:36:RED:CA 1:A:36:RED:C 12 1.9 (1,54) 1:A:38:LYS:N 1:A:36:RED:N 1:A:36:RED:CA 1:A:39:GLU:N 20 1.9 (1,54) 1:A:38:LYS:N 1:A:36:A6:RED:CA 1:A:39:GLU:N 20 1.9 (1,54) 1:A:38:LYS:N 1:A:36:A7:ARG:N 1:A:37:ARG:CA 1:A:39:GLU:N 20 1.9 (1,55) 1:A:19:PRO:N 1:A:19:PRO:CA 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 7 1.9 (1,255) 1:A:19:PRO:N 1:A:19:PRO:CA 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 7 1.9 (1,251) 1:A:13:EU:C 1:A:14:SER:CA 1:A:17:LEU:N 1 1.9 | | | | | | | |
| (1,167) | · · / | | l l | | | | |
| 1.83 | | | | | | | |
| (1,77) 1:A:78:GLU:C 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:79:MET:C 16 1.9 (1,57) 1:A:67:GLY:C 1:A:68:ILE:N 1:A:68:ILE:CA 1:A:68:ILE:CA 1:A:68:ILE:C 12 1.9 (1,54) 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:39:PRO:D 1:A:39:PRO:C 1:A:39:PRO:C 11 1.9 (1,51) 1:A:36:VALC 1:A:37:ARG:N 1:A:37:ARG:CA 1:A:37:ARG:C 11 1.9 (1,255) 1:A:19:PRO:N 1:A:19:PRO:CA 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 7 1.9 (1,255) 1:A:19:PRO:N 1:A:19:PRO:CA 1:A:20:MET:N 7 1.9 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:19:PRO:CA 1:A:20:MET:N 8 1.9 (1,251) 1:A:16:CS:N 1:A:18:CYS:CA 1:A:18:CYS:C 1:A:18:LYS:C 1:A:18:LYS:N 1 1.9 (1,247) 1:A:176:ILE:C 1:A:177:ILE:N 1:A:177:ILE:CA 1:A:177:ILE:C 3 1.9 (1,242) 1:A:176:ILE:C 1:A:177:ILE:CA 1:A:177:ILE:CA 1:A:177:ILE:CA | | | | | | | |
| (1,57) 1:A:67:GLY:C 1:A:68:ILE:N 1:A:68:ILE:CA 1:A:68:ILE:C 12 1.9 (1,54) 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:C 1:A:39:GLU:N 20 1.9 (1,51) 1:A:36:VAL:C 1:A:37:ARG:N 1:A:37:ARG:CA 1:A:37:ARG:C 11 1.9 (1,255) 1:A:19:PRO:N 1:A:19:PRO:CA 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 7 1.9 (1,255) 1:A:19:PRO:N 1:A:19:PRO:CA 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 8 1.9 (1,255) 1:A:19:PRO:N 1:A:19:PRO:CA 1:A:20:MET:N 8 1.9 (1,251) 1:A:18:CYS:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:20:MET:N 1 1.9 (1,251) 1:A:18:LCYS:N 1:A:18:CYS:CA 1:A:170:MET:N 1 1.9 (1,251) 1:A:170:MET:CH 1:A:170:MET:CA 1:A:177:ILE:CA 1:A:177:ILE:C 3 1.9 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:C 1:A:171:LEU:N 20 1.9 (1,23) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N <t< td=""><td>· · /</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></t<> | · · / | | | | | | |
| (1,54) | · · / | | | | | | |
| 1.51 | / | | | | | | |
| (1,255) 1:A:19:PRO:N 1:A:19:PRO:CA 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 7 1.9 (1,255) 1:A:19:PRO:N 1:A:19:PRO:CA 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 8 1.9 (1,255) 1:A:19:PRO:N 1:A:19:PRO:CA 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 8 1.9 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:18:CYS:CA 1:A:18:CYS:C 1:A:18:LEU:N 1 1.9 (1,247) 1:A:179:GLU:N 1:A:179:GLU:CA 1:A:180:LYS:C 1:A:180:LYS:N 6 1.9 (1,247) 1:A:176:ILE:C 1:A:177:ILE:N 1:A:177:ILE:CA 1:A:177:ILE:C 3 1.9 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:170:MET:C 1:A:141:D:N 1 1.9 (1,230) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 1 1.9 (1,23) 1:A:14:SEX:TYR:N 1:A:14:SEX:TYR:C 1:A:14:SEX:C 1 1.9 (1,23) 1:A:14:SEX:TYR:N 1:A:14:SEX:TYR:CA 1:A:14:SEX:CA 1:A:14:SEX:C 1 | | | | | | | |
| (1,255) 1:A:19:PRO:N 1:A:19:PRO:CA 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 8 1.9 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 11 1.9 (1,251) 1:A:181:CYS:N 1:A:181:CYS:CA 1:A:181:CYS:C 1:A:182:LEU:N 1 1.9 (1,247) 1:A:179:GLU:N 1:A:179:GLU:CA 1:A:179:GLU:C 1:A:180:LYS:N 6 1.9 (1,242) 1:A:176:ILE:C 1:A:177:ILE:CA 1:A:177:ILE:C 3 1.9 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:171:LEU:N 20 1.9 (1,230) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 1 1.9 (1,23) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 1 1.9 (1,231) 1:A:13:EU:C 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 1 1.9 (1,231) 1:A:13:SEXTYR:N 1:A:14:GLU:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:GLU:CA 1:A:14:GLU:CA 1:A:14:GLU:C | (' / | | | | | | |
| (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 11 1.9 (1,251) 1:A:181:CYS:N 1:A:181:CYS:CA 1:A:181:CYS:C 1:A:182:LEU:N 1 1.9 (1,247) 1:A:179:GLU:N 1:A:179:GLU:CA 1:A:179:GLU:C 1:A:180:LYS:N 6 1.9 (1,242) 1:A:176:ILE:C 1:A:177:ILE:N 1:A:177:ILE:CA 1:A:177:ILE:CN 1 1.9 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:C 1:A:170:MET:C 1:A:171:LEU:N 1 1.9 (1,230) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 1 1.9 (1,23) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 1 1.9 (1,23) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 1 1.9 (1,23) 1:A:13:SETYR:N 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 1 1.9 (1,213) 1:A:15:STYR:N 1:A:14:GLU:N 1:A:14:GEU:CA 1:A:15:SAG:N 16 | (' / | | | | | | |
| (1,251) 1:A:181:CYS:N 1:A:181:CYS:CA 1:A:181:CYS:C 1:A:182:LEU:N 1 1.9 (1,247) 1:A:179:GLU:N 1:A:179:GLU:CA 1:A:179:GLU:C 1:A:180:LYS:N 6 1.9 (1,242) 1:A:176:ILE:C 1:A:177:ILE:N 1:A:177:ILE:CA 1:A:177:ILE:C 3 1.9 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:171:LEU:N 1 1.9 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:171:LEU:N 20 1.9 (1,230) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 1 1.9 (1,23) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 1 1.9 (1,23) 1:A:13:EU:C 1:A:14:SER:TYR:CA 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 1 1.9 (1,23) 1:A:14:SER:TYR:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 12 1.9 (1,23) 1:A:15:STYR:N 1:A:15:S:TYR:CA 1:A:15:STYR:C 1:A:14:GGLU:C 12 1.9 | (1,255) | 1:A:19:PRO:N | 1:A:19:PRO:CA | 1:A:19:PRO:C | 1:A:20:MET:N | 8 | 1.9 |
| (1,247) 1:A:179:GLU:N 1:A:179:GLU:CA 1:A:179:GLU:C 1:A:180:LYS:N 6 1.9 (1,242) 1:A:176:ILE:C 1:A:177:ILE:N 1:A:177:ILE:CA 1:A:177:ILE:C 3 1.9 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:171:LEU:N 1 1.9 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:171:LEU:N 20 1.9 (1,23) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 1 1.9 (1,23) 1:A:13:LE:C 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:CC 1 1.9 (1,213) 1:A:14:A:A:A:A:A:A:A:A:A:A:A: | (1,253) | | | | | 11 | 1.9 |
| (1,242) 1:A:176:ILE:C 1:A:177:ILE:N 1:A:177:ILE:CA 1:A:177:ILE:C 3 1.9 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:171:LEU:N 1 1.9 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 1 1.9 (1,23) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 1 1.9 (1,231) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 1 1.9 (1,213) 1:A:13:LEU:C 1:A:14SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 1 1.9 (1,213) 1:A:13:LEU:C 1:A:14SER:N 1:A:14SER:CA 1:A:14:SER:C 1 1.9 (1,198) 1:A:14:SEX-TYR:N 1:A:158:TYR:CA 1:A:158:TYR:C 1:A:145:GLU:CA 1:A:145:GLU:C 20 1.9 (1,180) 1:A:13:ASA:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:146:GLU:C 12 1.9 (1,190) 1:A:13:ASA:ASN:C 1:A:19:THR:C 1:A:16:ASA:ASD:N 10 | (1,251) | 1:A:181:CYS:N | | 1:A:181:CYS:C | 1:A:182:LEU:N | | 1.9 |
| (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:171:LEU:N 1 1.9 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:171:LEU:N 20 1.9 (1,23) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 1 1.9 (1,23) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 12 1.9 (1,213) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 12 1.9 (1,213) 1:A:145:ALA:C 1:A:145:SETYR:CA 1:A:158:TYR:C 1:A:159:ARG:N 16 1.9 (1,198) 1:A:145:ALA:C 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:146:GLU:C 20 1.9 (1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:146:GLU:C 12 1.9 (1,140) 1:A:135:ASSN:C 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 12 1.9 (1,129) 1:A:105:LYS:C 1:A:106:ASN:N 1:A:106:ASN:N 1:A:106:ASN:C 17 1.9 | (1,247) | | | | | | 1.9 |
| (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:171:LEU:N 20 1.9 (1,23) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 1 1.9 (1,23) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 12 1.9 (1,213) 1:A:15:TYR:N 1:A:158:TYR:CA 1:A:159:TYR:C 1:A:159:ARG:N 16 1.9 (1,198) 1:A:145:ALA:C 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:146:GLU:C 20 1.9 (1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 12 1.9 (1,16) 1:A:9:THR:N 1:A:9:THR:CA 1:A:9:THR:C 1:A:10:ASP:N 10 1.9 (1,129) 1:A:105:LYS:C 1:A:106:ASN:N 1:A:106:ASN:CA 1:A:106:ASN:C 17 1.9 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 5 1.8 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:84:ASP:ALA:N 7 | (1,242) | 1:A:176:ILE:C | 1:A:177:ILE:N | 1:A:177:ILE:CA | 1:A:177:ILE:C | 3 | 1.9 |
| (1,23) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 1 1.9 (1,23) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 12 1.9 (1,213) 1:A:158:TYR:N 1:A:158:TYR:CA 1:A:158:TYR:C 1:A:159:ARG:N 16 1.9 (1,198) 1:A:145:ALA:C 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:146:GLU:C 20 1.9 (1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 12 1.9 (1,16) 1:A:9:THR:N 1:A:9:THR:CA 1:A:9:THR:C 1:A:10:ASP:N 10 1.9 (1,169) 1:A:105:LYS:C 1:A:106:ASN:N 1:A:106:ASN:CA 1:A:10:ASP:N 10 1.9 (1,29) 1:A:105:LYS:C 1:A:106:ASN:N 1:A:106:ASN:CA 1:A:10:ASP:N 10 1.9 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 5 1.8 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 7 < | (1,230) | 1:A:170:MET:N | 1:A:170:MET:CA | 1:A:170:MET:C | 1:A:171:LEU:N | 1 | 1.9 |
| (1,23) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 12 1.9 (1,213) 1:A:158:TYR:N 1:A:158:TYR:CA 1:A:158:TYR:C 1:A:159:ARG:N 16 1.9 (1,198) 1:A:145:ALA:C 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:146:GLU:C 20 1.9 (1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 12 1.9 (1,16) 1:A:9:THR:N 1:A:9:THR:CA 1:A:9:THR:C 1:A:10:ASP:N 10 1.9 (1,169) 1:A:105:LYS:C 1:A:106:ASN:N 1:A:106:ASN:CA 1:A:10:ASP:N 10 1.9 (1,129) 1:A:105:LYS:C 1:A:106:ASN:N 1:A:106:ASN:CA 1:A:106:ASN:C 17 1.9 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 5 1.8 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 7 1.8 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 6 1.8 <t< td=""><td>(1,230)</td><td>1:A:170:MET:N</td><td>1:A:170:MET:CA</td><td>1:A:170:MET:C</td><td>1:A:171:LEU:N</td><td>20</td><td>1.9</td></t<> | (1,230) | 1:A:170:MET:N | 1:A:170:MET:CA | 1:A:170:MET:C | 1:A:171:LEU:N | 20 | 1.9 |
| (1,213) 1:A:158:TYR:N 1:A:158:TYR:CA 1:A:158:TYR:C 1:A:159:ARG:N 16 1.9 (1,198) 1:A:145:ALA:C 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:146:GLU:C 20 1.9 (1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 12 1.9 (1,16) 1:A:9:THR:N 1:A:9:THR:CA 1:A:9:THR:C 1:A:10:ASP:N 10 1.9 (1,129) 1:A:105:LYS:C 1:A:106:ASN:N 1:A:106:ASN:CA 1:A:106:ASN:C 17 1.9 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 5 1.8 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 7 1.8 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:83:GLU:CA 1:A:85:ALA:N 7 1.8 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 6 1.8 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:C 1:A:80:ASN:N 20 1.8 | (1,23) | 1:A:13:LEU:C | 1:A:14:SER:N | 1:A:14:SER:CA | 1:A:14:SER:C | 1 | 1.9 |
| (1,198) 1:A:145:ALA:C 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:146:GLU:C 20 1.9 (1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 12 1.9 (1,16) 1:A:9:THR:N 1:A:9:THR:CA 1:A:9:THR:C 1:A:106:ASN:C 10 1.9 (1,129) 1:A:105:LYS:C 1:A:106:ASN:N 1:A:106:ASN:CA 1:A:106:ASN:C 17 1.9 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 5 1.8 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 7 1.8 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 7 1.8 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 7 1.8 (1,86) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 6 1.8 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 1 1 | (1,23) | 1:A:13:LEU:C | 1:A:14:SER:N | 1:A:14:SER:CA | 1:A:14:SER:C | 12 | 1.9 |
| (1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 12 1.9 (1,16) 1:A:9:THR:N 1:A:9:THR:CA 1:A:9:THR:C 1:A:10:ASP:N 10 1.9 (1,129) 1:A:105:LYS:C 1:A:106:ASN:N 1:A:106:ASN:CA 1:A:106:ASN:C 17 1.9 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 5 1.8 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 7 1.8 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 10 1.8 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 10 1.8 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 6 1.8 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 6 1.8 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:79:MET:C 1:A:80:ASN:N 20 1.8 | (1,213) | 1:A:158:TYR:N | 1:A:158:TYR:CA | 1:A:158:TYR:C | 1:A:159:ARG:N | 16 | 1.9 |
| (1,16) 1:A:9:THR:N 1:A:9:THR:CA 1:A:9:THR:C 1:A:10:ASP:N 10 1.9 (1,129) 1:A:105:LYS:C 1:A:106:ASN:N 1:A:106:ASN:CA 1:A:106:ASN:C 17 1.9 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 5 1.8 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 7 1.8 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 10 1.8 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 6 1.8 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 11 1.8 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:C 1:A:80:ASN:N 20 1.8 (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 1:A:4:TYR:N 9 1.8 (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 1:A:4:TYR:N 20 1.8 (1,35) | (1,198) | 1:A:145:ALA:C | 1:A:146:GLU:N | 1:A:146:GLU:CA | 1:A:146:GLU:C | 20 | 1.9 |
| (1,129) 1:A:105:LYS:C 1:A:106:ASN:N 1:A:106:ASN:CA 1:A:106:ASN:C 17 1.9 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 5 1.8 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 7 1.8 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 10 1.8 (1,86) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:85:ALA:N 10 1.8 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 6 1.8 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 11 1.8 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:C 1:A:80:ASN:N 20 1.8 (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 1:A:4:TYR:N 9 1.8 (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:CA 1:A:4:TYR:N 20 1.8 (1,35) <td>(1,180)</td> <td>1:A:135:ASN:C</td> <td>1:A:136:LEU:N</td> <td>1:A:136:LEU:CA</td> <td>1:A:136:LEU:C</td> <td>12</td> <td>1.9</td> | (1,180) | 1:A:135:ASN:C | 1:A:136:LEU:N | 1:A:136:LEU:CA | 1:A:136:LEU:C | 12 | 1.9 |
| (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 5 1.8 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 7 1.8 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 10 1.8 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 6 1.8 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 11 1.8 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:79:MET:C 1:A:80:ASN:N 20 1.8 (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 1:A:4:TYR:N 9 1.8 (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 1:A:4:TYR:N 20 1.8 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:CB 1:A:82:TYR:CG 1:A:82:TYR:CD1 16 1.8 (1,279) 1:A:82:TYR:CA 1:A:136:LEU:CB 1:A:136:LEU:CB 1:A:136:LEU:CG 3 1.8 | (1,16) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:ASP:N | 10 | 1.9 |
| (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 5 1.8 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 7 1.8 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 10 1.8 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 6 1.8 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 11 1.8 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:79:MET:C 1:A:80:ASN:N 20 1.8 (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 1:A:4:TYR:N 9 1.8 (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 1:A:4:TYR:N 20 1.8 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:CB 1:A:82:TYR:CA 1:A:82:TYR:CD1 16 1.8 (1,279) 1:A:82:TYR:CA 1:A:136:LEU:CB 1:A:136:LEU:CB 1:A:136:LEU:CG 3 1.8 | · · / | 1:A:105:LYS:C | 1:A:106:ASN:N | 1:A:106:ASN:CA | 1:A:106:ASN:C | 17 | 1.9 |
| (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 7 1.8 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 10 1.8 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 6 1.8 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 11 1.8 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:79:MET:C 1:A:80:ASN:N 20 1.8 (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 1:A:4:TYR:N 9 1.8 (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 1:A:4:TYR:N 9 1.8 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:82:TYR:CD 1 1.8 (1,279) 1:A:82:TYR:CA 1:A:82:TYR:CB 1:A:83:LEU:CB 1:A:136:LEU:CG 3 1.8 (1,266) 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:CB 1:A:136:LEU:CG 3 1.8 <td></td> <td>1:A:84:ASP:N</td> <td>1:A:84:ASP:CA</td> <td>1:A:84:ASP:C</td> <td>1:A:85:ALA:N</td> <td>5</td> <td>1.8</td> | | 1:A:84:ASP:N | 1:A:84:ASP:CA | 1:A:84:ASP:C | 1:A:85:ALA:N | 5 | 1.8 |
| (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 10 1.8 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 6 1.8 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 11 1.8 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:79:MET:C 1:A:80:ASN:N 20 1.8 (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 1:A:4:TYR:N 9 1.8 (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 1:A:4:TYR:N 9 1.8 (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 1.8 (1,279) 1:A:82:TYR:CA 1:A:82:TYR:CB 1:A:82:TYR:CG 1:A:82:TYR:CD1 16 1.8 (1,266) 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:CB 1:A:136:LEU:CG 3 1.8 | / | | | | | | |
| (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 6 1.8 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 11 1.8 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:79:MET:C 1:A:80:ASN:N 20 1.8 (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 1:A:4:TYR:N 9 1.8 (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 1:A:4:TYR:N 20 1.8 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 11 1.8 (1,279) 1:A:82:TYR:CA 1:A:82:TYR:CB 1:A:82:TYR:CG 1:A:82:TYR:CD1 16 1.8 (1,266) 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:CB 1:A:136:LEU:CG 3 1.8 | · · / | | | | | 10 | |
| (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 11 1.8 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:79:MET:C 1:A:80:ASN:N 20 1.8 (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 1:A:4:TYR:N 9 1.8 (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 1:A:4:TYR:N 20 1.8 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:CA 1:A:82:TYR:CB 1:A:82:TYR:CG 1:A:82:TYR:CD1 16 1.8 (1,266) 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:CB 1:A:136:LEU:CG 3 1.8 | / | | 1:A:83:GLU:N | 1:A:83:GLU:CA | | 6 | 1.8 |
| (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:79:MET:C 1:A:80:ASN:N 20 1.8 (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 1:A:4:TYR:N 9 1.8 (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 1:A:4:TYR:N 20 1.8 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 11 1.8 (1,279) 1:A:82:TYR:CA 1:A:82:TYR:CB 1:A:82:TYR:CG 1:A:82:TYR:CD1 16 1.8 (1,266) 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:CB 1:A:136:LEU:CG 3 1.8 | / | | | | | | |
| (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 1:A:4:TYR:N 9 1.8 (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 1:A:4:TYR:N 20 1.8 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 11 1.8 (1,279) 1:A:82:TYR:CA 1:A:82:TYR:CB 1:A:82:TYR:CG 1:A:82:TYR:CD1 16 1.8 (1,266) 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CB 1:A:136:LEU:CG 3 1.8 | / | | | | | | |
| (1,4) 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 1:A:4:TYR:N 20 1.8 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 11 1.8 (1,279) 1:A:82:TYR:CA 1:A:82:TYR:CB 1:A:82:TYR:CG 1:A:82:TYR:CD1 16 1.8 (1,266) 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:CB 1:A:136:LEU:CG 3 1.8 | · , | | | | | | |
| (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 11 1.8 (1,279) 1:A:82:TYR:CA 1:A:82:TYR:CB 1:A:82:TYR:CG 1:A:82:TYR:CD1 16 1.8 (1,266) 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:CB 1:A:136:LEU:CG 3 1.8 | , , | | | | | | |
| (1,279) 1:A:82:TYR:CA 1:A:82:TYR:CB 1:A:82:TYR:CG 1:A:82:TYR:CD1 16 1.8 (1,266) 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:CB 1:A:136:LEU:CG 3 1.8 | . , | | | | | | |
| (1,266) 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:CB 1:A:136:LEU:CG 3 1.8 | , , | | | | | | |
| | | | | | | | |
| (1.249) + 1:A:180:LYS:N + 1:A:180:LYS:CA + 1:A:180:LYS:C + 1:A:181:CYS:N + 20 + 1.8 | (1,249) | 1:A:180:LYS:N | 1:A:180:LYS:CA | 1:A:180:LYS:C | 1:A:181:CYS:N | 20 | 1.8 |



| | | ed from previous pag | | A | | 3.6 1.1.TD | T 7. 1 |
|--|---------|----------------------|----------------|----------------|----------------|------------|---------------|
| (1.230 1.A.170-MET.N | Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
| (1,227) | , , | | | | | | |
| (1,229) | (' / | | | | | | |
| (1,21) | · · / | | | | | | |
| (1,20) | · · / | | | | | | |
| (1,19) | · · / | | | | | | |
| (1,180 | · · / | | | | | | |
| (1,167) | (' / | | | | | | |
| (1.83) | \ ' / | | | | | | |
| (1,77) | \ ' / | | | | | | |
| (1,40) | · · / | | | | | | |
| (1,35) | \ ' / | | | | | | |
| (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 15 1.7 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 18 1.7 (1,245) 1:A:178:GLU:N 1:A:178:GLU:CA 1:A:178:GLU:C 1:A:179:GLU:C 17 1.7 (1,220) 1:A:164:CHR:C 1:A:165:GLU:N 1:A:165:GLU:CA 1:A:165:GLU:C 17 1.7 (1,197) 1:A:145:ALA:N 1:A:145:ALA:C 1:A:146:GLU:N 8 1.7 (1,197) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 15 1.7 (1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 15 1.7 (1,172) 1:A:131:ASP:C 1:A:34:ASP:N 1:A:34:ASP:CA 1:A:34:ASP:C 1:A:35:ALA:N 16 1.7 (1,86) 1:A:34:TYR:N 1:A:44:TYR:C 1:A:36:LYR:C 1:A:36:LYR:N 16 1.6 (1,781) 1:A:30:PHE:N 1:A:44:TYR:C 1:A:36:LYR:C 1:A:36:LYR:N 3 | · · / | | | | | | |
| 1.4.26 LEUN | · · / | | | | | | |
| (1,245) 1:A:178:GLU:N 1:A:178:GLU:CA 1:A:178:GLU:C 1:A:179:GLU:N 5 1.7 | , , | | | | | | |
| (1,220) 1:A:164:THR:C | · · / | | | | | | |
| (1,211) 1:A:157:GLU:N 1:A:157:GLU:CA 1:A:157:GLU:C 1:A:145:ALA:N 19 1.7 (1,190) 1:A:145:ALA:N 1:A:145:ALA:CA 1:A:145:ALA:C 1:A:146:GLU:N 8 1.7 (1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:A 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 15 1.7 (1,172) 1:A:131:ASP:C 1:A:132:ARG:N 1:A:132:ARG:C 16 1.7 (1,86) 1:A:34:ASP:N 1:A:34:ASP:CA 1:A:34:ASP:C 1:A:35:ALA:N 16 1.6 (1,86) 1:A:34:ASP:N 1:A:34:ASP:CA 1:A:34:ASP:C 1:A:35:ALA:N 16 1.6 (1,86) 1:A:34:ASP:N 1:A:39:MET:CA 1:A:34:TYR:C 1:A:35:ALA:N 16 1.6 (1,78) 1:A:43:TYR:N 1:A:44:TYR:CA 1:A:44:TYR:C 1:A:35:LYS:N 3 1.6 (1,40) 1:A:30:PHE:N 1:A:30:PHE:CA 1:A:30:PHE:C 1:A:31:LYS:N 14 1.6 (1,38) 1:A:29:GLU:CA 1:A:39:PHE:CA 1:A:38:PHE:CB 1:A:38:PHE:CB 3 1.6 <t< td=""><td>· · /</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></t<> | · · / | | | | | | |
| (1,197) 1:A:145:ALA:N 1:A:145:ALA:CA 1:A:145:ALA:C 1:A:146:GLU:N 8 1.7 (1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 15 1.7 (1,172) 1:A:13:ASP:C 1:A:13:ASR:ASP:N 1:A:23:ARG:CA 1:A:13:ARG:CA 16 1.7 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 16 1.6 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:79:MET:CA 1:A:43:ASP:C 1:A:85:ALA:N 16 1.6 (1,86) 1:A:39:MET:N 1:A:479:MET:CA 1:A:47PR:C 1:A:85:ALA:N 16 1.6 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:479:MET:CA 1:A:30:PMET:C 1:A:38:ASP:NET 3 1.6 (1,40) 1:A:30:PME:N 1:A:479:MET:CA 1:A:30:PMET.C 1:A:30:PMET.CA 1:A:40:MET.CA 1:A:170:MET.CA 1:A:170:MET.CA 1:A:170 | · · / | | | | | | |
| (1,180) 1:A:135:ASN:C | (1,211) | 1:A:157:GLU:N | | 1:A:157:GLU:C | 1:A:158:TYR:N | | 1.7 |
| (1,172) 1:A:131:ASP:C 1:A:132:ARG:N 1:A:132:ARG:C 16 1.7 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:C 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 13 1.6 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 16 1.6 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 16 1.6 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:84:TYR:C 1:A:85:ALA:N 12 1.6 (1,6) 1:A:4:TYR:N 1:A:4:TYR:CA 1:A:4:TYR:C 1:A:5:LYS:N 3 1.6 (1,40) 1:A:30:PHE:N 1:A:30:PHE:CA 1:A:30:PHE:C 1:A:31:LYS:N 3 1.6 (1,286) 1:A:88:PHE:N 1:A:88:PHE:CA 1:A:88:PHE:CB 1:A:30:PHE:N 9 1.6 (1,286) 1:A:88:PHE:N 1:A:48:PHE:CB 1:A:88:PHE:CB 1:A:88:PHE:CG 3 1.6 (1,279) 1:A:48:PHE:N 1:A:19:PRO:CA 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 14 1.6 (1,2 | (1,197) | 1:A:145:ALA:N | 1:A:145:ALA:CA | 1:A:145:ALA:C | 1:A:146:GLU:N | 8 | 1.7 |
| (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 13 1.6 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 16 1.6 1.6 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:79:MET:C 1:A:85:ALA:N 12 1.6 (1,6) 1:A:4:TYR:N 1:A:79:MET:CA 1:A:79:MET:C 1:A:85:ALA:N 3 1.6 (1,40) 1:A:30:PHE:N 1:A:30:PHE:CA 1:A:30:PHE:C 1:A:5LYS:N 3 1.6 (1,40) 1:A:30:PHE:N 1:A:30:PHE:CA 1:A:30:PHE:C 1:A:31:LYS:N 14 1.6 (1,38) 1:A:29:GLU:N 1:A:29:GLU:CA 1:A:29:GLU:C 1:A:30:PHE:N 9 1.6 (1,286) 1:A:88:PHE:N 1:A:88:PHE:CA 1:A:88:PHE:CB 1:A:88:PHE:CG 3 1.6 (1,279) 1:A:88:PHE:N 1:A:88:PHE:CA 1:A:89:TYR:CG 1:A:82:TYR:CD 1 6 1.6 (1,255) 1:A:19:PRO:N 1:A:19:PRO:CA 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 14 1.6 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 12 1.6 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:170:MET:N 1.6 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:171:LEU:N 15 1.6 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 1:A:169:LEU:C 18 1.6 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 19 1.6 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 19 1.6 (1,220) 1:A:151:GLY:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:C 19 1.6 (1,214) 1:A:169:ARG:C 1:A:169:LEU:C 1:A:169:LEU:C 19 1.6 (1,214) 1:A:169:ARG:C 1:A:169:LEU:C 1:A:169:LEU:C 19 1.6 (1,214) 1:A:169:ARG:C 1:A:160:ASP:N 1:A:165:GLU:C 19 1.6 (1,214) 1:A:169:ARG:C 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:C 3 1.6 (1,214) 1:A:169:ARG:C 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:C 3 1.6 (1,214) 1:A:169:ARG:C 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:C 3 1.6 (1,214) 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP | (1,180) | 1:A:135:ASN:C | 1:A:136:LEU:N | 1:A:136:LEU:CA | 1:A:136:LEU:C | 15 | 1.7 |
| (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 16 1.6 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:49:MET:C 1:A:80:ASN:N 12 1.6 (1,6) 1:A:4*TYR:N 1:A:4*TYR:CA 1:A:30:PHE:C 1:A:80:ASN:N 3 1.6 (1,40) 1:A:30:PHE:N 1:A:30:PHE:CA 1:A:30:PHE:C 1:A:30:PHE:N 9 1.6 (1,38) 1:A:29:GLU:N 1:A:89:PHE:CA 1:A:89:PHE:CB 1:A:89:PHE:N 9 1.6 (1,286) 1:A:88:PHE:N 1:A:88:PHE:CA 1:A:88:PHE:CB 1:A:88:PHE:CG 3 1.6 (1,286) 1:A:88:PHE:N 1:A:88:PHE:CA 1:A:88:PHE:CB 1:A:88:PHE:N 9 1.6 (1,285) 1:A:19:PRO:N 1:A:18:PPRO:CA 1:A:88:PHE:CB 1:A:88:PHE:N 9 1.6 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:19:PRO:CA 1:A:39:PRO:C 1:A:32:METN 14 1.6 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:1670:MET:CA 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:CA | (1,172) | 1:A:131:ASP:C | 1:A:132:ARG:N | 1:A:132:ARG:CA | 1:A:132:ARG:C | 16 | 1.7 |
| (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:79:MET:C 1:A:80:ASN:N 12 1.6 (1,6) 1:A:4:TYR:N 1:A:4:TYR:CA 1:A:4:TYR:C 1:A:5:LYS:N 3 1.6 (1,40) 1:A:30:PHE:N 1:A:30:PHE:CA 1:A:30:PHE:C 1:A:31:LYS:N 14 1.6 (1,38) 1:A:29:GLU:N 1:A:29:GLU:CA 1:A:39:PHE:N 9 1.6 (1,286) 1:A:88:PHE:N 1:A:88:PHE:CA 1:A:88:PHE:CB 1:A:88:PHE:CG 3 1.6 (1,279) 1:A:82:TYR:CA 1:A:82:TYR:CB 1:A:82:TYR:CB 1:A:82:TYR:CD 6 1.6 (1,279) 1:A:82:TYR:CA 1:A:429:PRO:CA 1:A:29:PRO:C 1:A:22:TYR:CD1 6 1.6 (1,253) 1:A:19:PRO:N 1:A:19:PRO:CA 1:A:43:EPRO:C 1:A:42:TYAL:N 12 1.6 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:16:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:171:LEU:N 19 1.6 (1,230) 1:A:13:3:LEU:C 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 13 1.6 (1,227) | (1,86) | 1:A:84:ASP:N | 1:A:84:ASP:CA | 1:A:84:ASP:C | 1:A:85:ALA:N | 13 | 1.6 |
| (1,6) 1:A:4:TYR:N 1:A:4:TYR:CA 1:A:4:TYR:C 1:A:5:LYS:N 3 1.6 (1,40) 1:A:30:PHE:N 1:A:30:PHE:CA 1:A:30:PHE:C 1:A:31:LYS:N 14 1.6 (1,38) 1:A:29:GLU:N 1:A:29:GLU:CA 1:A:30:PHE:CB 1:A:31:LYS:N 9 1.6 (1,286) 1:A:82:TYR:CA 1:A:82:PHE:CB 1:A:82:PHE:CG 3 1.6 (1,279) 1:A:82:TYR:CA 1:A:82:TYR:CG 1:A:82:TYR:CD1 6 1.6 (1,255) 1:A:19:PRO:N 1:A:19:PRO:CA 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 14 1.6 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:170:MET:N 12 1.6 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:171:LEU:N 15 1.6 (1,230) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N 1:A:140:SER:CA 1:A:140:LEU:N 19 1.6 (1,230) 1:A:16:STHR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:160:LEU:C 18 1.6 (1,227) | (1,86) | 1:A:84:ASP:N | 1:A:84:ASP:CA | 1:A:84:ASP:C | 1:A:85:ALA:N | 16 | 1.6 |
| (1,40) 1:A:30:PHE:N 1:A:30:PHE:CA 1:A:30:PHE:C 1:A:31:LYS:N 14 1.6 (1,38) 1:A:29:GLU:N 1:A:29:GLU:CA 1:A:29:GLU:C 1:A:30:PHE:N 9 1.6 (1,286) 1:A:88:PHE:N 1:A:88:PHE:CA 1:A:88:PHE:CB 1:A:30:PHE:N 9 1.6 (1,279) 1:A:88:PHE:N 1:A:88:PHE:CB 1:A:30:PHE:CB 1:A:30:PHE:N 9 1.6 (1,279) 1:A:82:TYR:CA 1:A:82:TYR:CB 1:A:82:TYR:CG 1:A:82:TYR:CD1 6 1.6 (1,279) 1:A:19:PRO:N 1:A:19:PRO:CA 1:A:48:2TYR:CD1 6 1.6 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 12 1.6 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:171:LEU:N 15 1.6 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:141-LEU:N 15 1.6 (1,230) 1:A:168:THR:C 1:A:146:SER:CA 1:A:141-LEU:N 19 1.6 (1,227) <td>(1,78)</td> <td>1:A:79:MET:N</td> <td>1:A:79:MET:CA</td> <td>1:A:79:MET:C</td> <td>1:A:80:ASN:N</td> <td>12</td> <td>1.6</td> | (1,78) | 1:A:79:MET:N | 1:A:79:MET:CA | 1:A:79:MET:C | 1:A:80:ASN:N | 12 | 1.6 |
| (1,38) 1:A:29:GLU:N 1:A:29:GLU:CA 1:A:29:GLU:C 1:A:30:PHE:N 9 1.6 (1,286) 1:A:88:PHE:N 1:A:88:PHE:CA 1:A:88:PHE:CB 1:A:88:PHE:CG 3 1.6 (1,279) 1:A:82:TYR:CA 1:A:82:TYR:CB 1:A:82:TYR:CG 1:A:82:TYR:CD1 6 1.6 (1,275) 1:A:19:PRO:N 1:A:19:PRO:CA 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 14 1.6 (1,253) 1:A:170:MET:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:170:MET:CC 1:A:171:LEU:N 12 1.6 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:171:LEU:N 19 1.6 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:160:MET:CA 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 13 1.6 (1,231) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 18 1.6 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 19 1.6 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C <t< td=""><td>(1,6)</td><td>1:A:4:TYR:N</td><td>1:A:4:TYR:CA</td><td>1:A:4:TYR:C</td><td>1:A:5:LYS:N</td><td>3</td><td>1.6</td></t<> | (1,6) | 1:A:4:TYR:N | 1:A:4:TYR:CA | 1:A:4:TYR:C | 1:A:5:LYS:N | 3 | 1.6 |
| (1,286) 1:A:88:PHE:N 1:A:88:PHE:CA 1:A:88:PHE:CB 1:A:88:PHE:CG 3 1.6 (1,279) 1:A:82:TYR:CA 1:A:82:TYR:CB 1:A:82:TYR:CG 1:A:82:TYR:CD1 6 1.6 (1,255) 1:A:19:PRO:N 1:A:19:PRO:CA 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 14 1.6 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 12 1.6 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:171:LEU:N 15 1.6 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:171:LEU:N 19 1.6 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:160:MET:CA 1:A:16:SER:CA 1:A:171:LEU:N 19 1.6 (1,230) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 18 1.6 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 19 1.6 (1,220) 1:A:164:THR:C 1:A:166:GU:N 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C | (1,40) | 1:A:30:PHE:N | 1:A:30:PHE:CA | 1:A:30:PHE:C | 1:A:31:LYS:N | 14 | 1.6 |
| (1,279) 1:A:82:TYR:CA 1:A:82:TYR:CB 1:A:82:TYR:CG 1:A:82:TYR:CD1 6 1.6 (1,255) 1:A:19:PRO:N 1:A:19:PRO:CA 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 14 1.6 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 12 1.6 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:171:LEU:N 19 1.6 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:171:LEU:N 19 1.6 (1,230) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N 1.6 1.6 1.227 1:A:168:THR:C 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:C 13 1.6 1.6 1.227 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:C 18 1.6 1.227 1:A:164:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:C 19 1.6 1.220 1:A:164:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:C 19 1.6 1.220 1:A:164:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:C 19 1.6 1.220 1:A:164:THR:C < | (1,38) | 1:A:29:GLU:N | 1:A:29:GLU:CA | 1:A:29:GLU:C | | 9 | 1.6 |
| (1,255) 1:A:19:PRO:N 1:A:19:PRO:CA 1:A:19:PRO:C 1:A:20:MET:N 14 1.6 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:470:MET:C 1:A:4770:MET:N 12 1.6 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:171:LEU:N 15 1.6 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:171:LEU:N 19 1.6 (1,231) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 13 1.6 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 18 1.6 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 19 1.6 (1,220) 1:A:164:THR:C 1:A:165:GLU:N 1:A:160:ASP:CA 1:A:165:GLU:C 19 1.6 (1,214) 1:A:159:ARG:C 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C 3 1.6 (1,200) 1:A:131:ASP:C 1:A:132:AG:CA 1:A:147:GLY:N 1 1.6 <td>(1,286)</td> <td>1:A:88:PHE:N</td> <td>1:A:88:PHE:CA</td> <td>1:A:88:PHE:CB</td> <td>1:A:88:PHE:CG</td> <td>3</td> <td>1.6</td> | (1,286) | 1:A:88:PHE:N | 1:A:88:PHE:CA | 1:A:88:PHE:CB | 1:A:88:PHE:CG | 3 | 1.6 |
| (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 12 1.6 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:171:LEU:N 15 1.6 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:171:LEU:N 19 1.6 (1,23) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 13 1.6 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 18 1.6 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 19 1.6 (1,220) 1:A:164:THR:C 1:A:165:GLU:N 1:A:165:GLU:CA 1:A:165:GLU:C 19 1.6 (1,214) 1:A:159:ARG:C 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C 3 1.6 (1,240) 1:A:146:GLU:C 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C 3 1.6 (1,214) 1:A:159:ARG:C 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:CA 1:A:146:GLU:C | (1,279) | 1:A:82:TYR:CA | 1:A:82:TYR:CB | 1:A:82:TYR:CG | 1:A:82:TYR:CD1 | 6 | 1.6 |
| (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:171:LEU:N 15 1.6 (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:171:LEU:N 19 1.6 (1,23) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 13 1.6 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 18 1.6 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 19 1.6 (1,220) 1:A:164:THR:C 1:A:165:GLU:N 1:A:165:GLU:CA 1:A:160:ASP:C 19 1.6 (1,214) 1:A:164:THR:C 1:A:165:GLU:N 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C 3 1.6 (1,200) 1:A:164:GLY:C 1:A:160:ASP:N 1:A:152:GLN:CA 1:A:147:GLY:N 1 1.6 (1,199) 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:147:GLY:N 1 1.6 (1,172) 1:A:131:ASP:C 1:A:132:ARG:N 1:A:132:ARG:CA 1:A:132:ARG:C 14 1. | (1,255) | 1:A:19:PRO:N | 1:A:19:PRO:CA | 1:A:19:PRO:C | 1:A:20:MET:N | 14 | 1.6 |
| (1,230) 1:A:170:MET:N 1:A:170:MET:CA 1:A:170:MET:C 1:A:171:LEU:N 19 1.6 (1,23) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 13 1.6 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 18 1.6 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 19 1.6 (1,220) 1:A:164:THR:C 1:A:165:GLU:N 1:A:165:GLU:CA 1:A:165:GLU:C 19 1.6 (1,214) 1:A:159:ARG:C 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C 3 1.6 (1,200) 1:A:151:GLY:C 1:A:152:GLN:N 1:A:152:GLN:CA 1:A:146:GLU:C 14 1.6 (1,199) 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:146:GLU:C 1:A:147:GLY:N 1 1.6 (1,172) 1:A:131:ASP:C 1:A:132:ARG:N 1:A:132:ARG:C 1:A:131:ASP:N 1.7 1.6 (1,171) 1:A:131:ASP:N 1:A:131:ASP:CA 1:A:131:ASP:N 1:A:132:ARG:N | (1,253) | 1:A:26:LEU:N | 1:A:26:LEU:CA | 1:A:26:LEU:C | 1:A:27:VAL:N | 12 | 1.6 |
| (1,23) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 13 1.6 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 18 1.6 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 19 1.6 (1,220) 1:A:164:THR:C 1:A:165:GLU:N 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C 19 1.6 (1,214) 1:A:159:ARG:C 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C 3 1.6 (1,200) 1:A:151:GLY:C 1:A:152:GLN:N 1:A:152:GLN:CA 1:A:152:GLN:C 14 1.6 (1,199) 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:146:GLU:C 1:A:147:GLY:N 1 1.6 (1,199) 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:146:GLU:C 1:A:147:GLY:N 17 1.6 (1,171) 1:A:131:ASP:C 1:A:132:ARG:CA 1:A:132:ARG:C 14 1.6 (1,171) 1:A:131:ASP:N 1:A:131:ASP:CA 1:A:131:ASP:N 6 1.6 | (1,230) | 1:A:170:MET:N | 1:A:170:MET:CA | 1:A:170:MET:C | 1:A:171:LEU:N | 15 | 1.6 |
| (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 18 1.6 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 19 1.6 (1,220) 1:A:164:THR:C 1:A:165:GLU:N 1:A:165:GLU:CA 1:A:165:GLU:C 19 1.6 (1,220) 1:A:164:THR:C 1:A:165:GLU:N 1:A:165:GLU:CA 1:A:160:ASP:C 3 1.6 (1,214) 1:A:159:ARG:C 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C 3 1.6 (1,200) 1:A:151:GLY:C 1:A:152:GLN:N 1:A:152:GLN:CA 1:A:152:GLN:C 14 1.6 (1,199) 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:146:GLU:C 1:A:147:GLY:N 1 1.6 (1,199) 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:147:GLY:N 17 1.6 (1,172) 1:A:131:ASP:C 1:A:132:ARG:N 1:A:132:ARG:C 14 1.6 (1,171) 1:A:131:ASP:N 1:A:131:ASP:C 1:A:132:ARG:N 6 1.6 (1,131) < | (1,230) | 1:A:170:MET:N | 1:A:170:MET:CA | 1:A:170:MET:C | 1:A:171:LEU:N | 19 | 1.6 |
| (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 19 1.6 (1,220) 1:A:164:THR:C 1:A:165:GLU:N 1:A:165:GLU:CA 1:A:165:GLU:C 19 1.6 (1,214) 1:A:159:ARG:C 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C 3 1.6 (1,200) 1:A:151:GLY:C 1:A:152:GLN:N 1:A:152:GLN:CA 1:A:152:GLN:C 14 1.6 (1,199) 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:146:GLU:C 1:A:147:GLY:N 1 1.6 (1,199) 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:146:GLU:C 1:A:147:GLY:N 17 1.6 (1,172) 1:A:131:ASP:C 1:A:132:ARG:N 1:A:132:ARG:C 14 1.6 (1,171) 1:A:131:ASP:N 1:A:131:ASP:CA 1:A:131:ASP:C 1:A:132:ARG:N 6 1.6 (1,131) 1:A:108:ARG:N 1:A:108:ARG:C 1:A:109:ASP:N 8 1.6 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:68:ILE:N 1:A:68:ILE:CA 1:A:88:IASN:N 4 1.5 | (1,23) | 1:A:13:LEU:C | 1:A:14:SER:N | 1:A:14:SER:CA | 1:A:14:SER:C | 13 | 1.6 |
| (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 19 1.6 (1,220) 1:A:164:THR:C 1:A:165:GLU:N 1:A:165:GLU:CA 1:A:165:GLU:C 19 1.6 (1,214) 1:A:159:ARG:C 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C 3 1.6 (1,200) 1:A:151:GLY:C 1:A:152:GLN:N 1:A:152:GLN:CA 1:A:152:GLN:C 14 1.6 (1,199) 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:146:GLU:C 1:A:147:GLY:N 1 1.6 (1,199) 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:146:GLU:C 1:A:147:GLY:N 1 1.6 (1,199) 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:146:GLU:C 1:A:147:GLY:N 1 1.6 (1,191) 1:A:131:ASP:C 1:A:132:ARG:C 1 1 1.6 (1,171) 1:A:131:ASP:N 1:A:131:ASP:CA 1:A:132:ARG:N 6 1.6 (1,131) 1:A:108:ARG:N 1:A:108:ARG:CA 1:A:109:ASP:N 8 1.6 (1,78) 1:A:67:GLY:C | (1,227) | 1:A:168:THR:C | 1:A:169:LEU:N | 1:A:169:LEU:CA | 1:A:169:LEU:C | 18 | 1.6 |
| (1,214) 1:A:159:ARG:C 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C 3 1.6 (1,200) 1:A:151:GLY:C 1:A:152:GLN:N 1:A:152:GLN:CA 1:A:152:GLN:C 14 1.6 (1,199) 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:146:GLU:C 1:A:147:GLY:N 1 1.6 (1,199) 1:A:146:GLU:N 1:A:132:ARG:N 1:A:132:ARG:C 14 1.6 (1,172) 1:A:131:ASP:C 1:A:132:ARG:N 1:A:132:ARG:C 14 1.6 (1,171) 1:A:131:ASP:N 1:A:131:ASP:CA 1:A:131:ASP:C 1:A:132:ARG:N 6 1.6 (1,131) 1:A:108:ARG:N 1:A:108:ARG:C 1:A:132:ARG:N 6 1.6 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:108:ARG:C 1:A:109:ASP:N 8 1.6 (1,75) 1:A:67:GLY:C 1:A:68:ILE:N 1:A:68:ILE:CA 1:A:68:ILE:C 7 1.5 (1,53) 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:N 8 1.5 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:33:ILE:CA <td></td> <td>1:A:168:THR:C</td> <td>1:A:169:LEU:N</td> <td>1:A:169:LEU:CA</td> <td>1:A:169:LEU:C</td> <td>19</td> <td>1.6</td> | | 1:A:168:THR:C | 1:A:169:LEU:N | 1:A:169:LEU:CA | 1:A:169:LEU:C | 19 | 1.6 |
| (1,200) 1:A:151:GLY:C 1:A:152:GLN:N 1:A:152:GLN:CA 1:A:152:GLN:C 14 1.6 (1,199) 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:146:GLU:C 1:A:147:GLY:N 1 1.6 (1,199) 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:146:GLU:C 1:A:147:GLY:N 17 1.6 (1,172) 1:A:131:ASP:C 1:A:132:ARG:N 1:A:132:ARG:CA 1:A:132:ARG:C 14 1.6 (1,171) 1:A:131:ASP:N 1:A:131:ASP:CA 1:A:131:ASP:C 1:A:132:ARG:N 6 1.6 (1,131) 1:A:108:ARG:N 1:A:108:ARG:CA 1:A:109:ASP:N 8 1.6 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:79:MET:C 1:A:80:ASN:N 4 1.5 (1,57) 1:A:67:GLY:C 1:A:68:ILE:N 1:A:68:ILE:CA 1:A:68:ILE:C 7 1.5 (1,52) 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:N 8 1.5 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:33:ILE:C 3 1.5 (1,3) | (1,220) | 1:A:164:THR:C | 1:A:165:GLU:N | 1:A:165:GLU:CA | 1:A:165:GLU:C | 19 | 1.6 |
| (1,199) 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:146:GLU:C 1:A:147:GLY:N 1 1.6 (1,199) 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:146:GLU:C 1:A:147:GLY:N 17 1.6 (1,172) 1:A:131:ASP:C 1:A:132:ARG:N 1:A:132:ARG:C 14 1.6 (1,171) 1:A:131:ASP:N 1:A:131:ASP:CA 1:A:131:ASP:C 1:A:132:ARG:N 6 1.6 (1,131) 1:A:108:ARG:N 1:A:108:ARG:CA 1:A:108:ARG:C 1:A:109:ASP:N 8 1.6 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:79:MET:C 1:A:80:ASN:N 4 1.5 (1,57) 1:A:67:GLY:C 1:A:68:ILE:N 1:A:68:ILE:CA 1:A:68:ILE:C 7 1.5 (1,53) 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:N 8 1.5 (1,52) 1:A:37:ARG:N 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 14 1.5 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:33:ILE:N 1:A:33:ILE:CA 1:A:33:ILE:C 3 1.5 | (1,214) | 1:A:159:ARG:C | 1:A:160:ASP:N | 1:A:160:ASP:CA | 1:A:160:ASP:C | 3 | 1.6 |
| (1,199) 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:146:GLU:C 1:A:147:GLY:N 17 1.6 (1,172) 1:A:131:ASP:C 1:A:132:ARG:N 1:A:132:ARG:CA 1:A:132:ARG:C 14 1.6 (1,171) 1:A:131:ASP:N 1:A:131:ASP:CA 1:A:131:ASP:C 1:A:132:ARG:N 6 1.6 (1,131) 1:A:108:ARG:N 1:A:108:ARG:CA 1:A:108:ARG:C 1:A:109:ASP:N 8 1.6 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:79:MET:C 1:A:80:ASN:N 4 1.5 (1,57) 1:A:67:GLY:C 1:A:68:ILE:N 1:A:68:ILE:CA 1:A:68:ILE:C 7 1.5 (1,53) 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:N 8 1.5 (1,52) 1:A:37:ARG:N 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 14 1.5 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:3:ILE:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:3:ILE:C 3 1.5 (1,3) 1:A:2:LEU:C 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 3 1.5 <td>(1,200)</td> <td>1:A:151:GLY:C</td> <td>1:A:152:GLN:N</td> <td>1:A:152:GLN:CA</td> <td>1:A:152:GLN:C</td> <td>14</td> <td>1.6</td> | (1,200) | 1:A:151:GLY:C | 1:A:152:GLN:N | 1:A:152:GLN:CA | 1:A:152:GLN:C | 14 | 1.6 |
| (1,172) 1:A:131:ASP:C 1:A:132:ARG:N 1:A:132:ARG:CA 1:A:132:ARG:C 14 1.6 (1,171) 1:A:131:ASP:N 1:A:131:ASP:CA 1:A:131:ASP:C 1:A:132:ARG:N 6 1.6 (1,131) 1:A:108:ARG:N 1:A:108:ARG:CA 1:A:108:ARG:C 1:A:109:ASP:N 8 1.6 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:79:MET:C 1:A:80:ASN:N 4 1.5 (1,57) 1:A:67:GLY:C 1:A:68:ILE:N 1:A:68:ILE:CA 1:A:68:ILE:C 7 1.5 (1,53) 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:C 5 1.5 (1,52) 1:A:37:ARG:N 1:A:37:ARG:CA 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 8 1.5 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 14 1.5 (1,3) 1:A:2:LEU:C 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 3 1.5 | (1,199) | 1:A:146:GLU:N | 1:A:146:GLU:CA | 1:A:146:GLU:C | 1:A:147:GLY:N | 1 | 1.6 |
| (1,171) 1:A:131:ASP:N 1:A:131:ASP:CA 1:A:131:ASP:C 1:A:132:ARG:N 6 1.6 (1,131) 1:A:108:ARG:N 1:A:108:ARG:CA 1:A:108:ARG:C 1:A:109:ASP:N 8 1.6 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:79:MET:C 1:A:80:ASN:N 4 1.5 (1,57) 1:A:67:GLY:C 1:A:68:ILE:N 1:A:68:ILE:CA 1:A:68:ILE:C 7 1.5 (1,53) 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:C 5 1.5 (1,52) 1:A:37:ARG:N 1:A:37:ARG:CA 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 8 1.5 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 14 1.5 (1,3) 1:A:2:LEU:C 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 3 1.5 | (1,199) | 1:A:146:GLU:N | 1:A:146:GLU:CA | 1:A:146:GLU:C | 1:A:147:GLY:N | 17 | 1.6 |
| (1,131) 1:A:108:ARG:N 1:A:108:ARG:CA 1:A:108:ARG:C 1:A:109:ASP:N 8 1.6 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:79:MET:C 1:A:80:ASN:N 4 1.5 (1,57) 1:A:67:GLY:C 1:A:68:ILE:N 1:A:68:ILE:CA 1:A:68:ILE:C 7 1.5 (1,53) 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:C 5 1.5 (1,52) 1:A:37:ARG:N 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 8 1.5 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 14 1.5 (1,3) 1:A:2:LEU:C 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 3 1.5 | (1,172) | 1:A:131:ASP:C | 1:A:132:ARG:N | 1:A:132:ARG:CA | 1:A:132:ARG:C | 14 | 1.6 |
| (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:79:MET:C 1:A:80:ASN:N 4 1.5 (1,57) 1:A:67:GLY:C 1:A:68:ILE:N 1:A:68:ILE:CA 1:A:68:ILE:C 7 1.5 (1,53) 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:C 5 1.5 (1,52) 1:A:37:ARG:N 1:A:37:ARG:CA 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 8 1.5 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 14 1.5 (1,3) 1:A:2:LEU:C 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 3 1.5 | (1,171) | 1:A:131:ASP:N | 1:A:131:ASP:CA | 1:A:131:ASP:C | 1:A:132:ARG:N | 6 | 1.6 |
| (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:79:MET:C 1:A:80:ASN:N 4 1.5 (1,57) 1:A:67:GLY:C 1:A:68:ILE:N 1:A:68:ILE:CA 1:A:68:ILE:C 7 1.5 (1,53) 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:C 5 1.5 (1,52) 1:A:37:ARG:N 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 8 1.5 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 14 1.5 (1,3) 1:A:2:LEU:C 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 3 1.5 | (1,131) | 1:A:108:ARG:N | 1:A:108:ARG:CA | 1:A:108:ARG:C | 1:A:109:ASP:N | 8 | 1.6 |
| (1,57) 1:A:67:GLY:C 1:A:68:ILE:N 1:A:68:ILE:CA 1:A:68:ILE:C 7 1.5 (1,53) 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:C 5 1.5 (1,52) 1:A:37:ARG:N 1:A:37:ARG:CA 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 8 1.5 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 14 1.5 (1,3) 1:A:2:LEU:C 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 3 1.5 | (1,78) | 1:A:79:MET:N | 1:A:79:MET:CA | 1:A:79:MET:C | 1:A:80:ASN:N | 4 | 1.5 |
| (1,53) 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:C 5 1.5 (1,52) 1:A:37:ARG:N 1:A:37:ARG:CA 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 8 1.5 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 14 1.5 (1,3) 1:A:2:LEU:C 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 3 1.5 | / | 1:A:67:GLY:C | 1:A:68:ILE:N | 1:A:68:ILE:CA | 1:A:68:ILE:C | 7 | 1.5 |
| (1,52) 1:A:37:ARG:N 1:A:37:ARG:CA 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 8 1.5 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 14 1.5 (1,3) 1:A:2:LEU:C 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 3 1.5 | · · / | | | | | 5 | |
| (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 14 1.5 (1,3) 1:A:2:LEU:C 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 3 1.5 | ` ′ | | | | | 8 | |
| (1,3) 1:A:2:LEU:C 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 3 1.5 | ` , | | | | | | |
| | · · / | | | 1:A:3:ILE:CA | | 3 | |
| 1 | (1,293) | 1:A:30:PHE:CA | 1:A:30:PHE:CB | 1:A:30:PHE:CG | 1:A:30:PHE:CD1 | 7 | 1.5 |



| Continued from previous page | | | | | | | | |
|------------------------------|------------------|------------------|-----------------|-----------------|----------|----------------|--|--|
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) | | |
| (1,230) | 1:A:170:MET:N | 1:A:170:MET:CA | 1:A:170:MET:C | 1:A:171:LEU:N | 3 | 1.5 | | |
| (1,22) | 1:A:12:GLU:N | 1:A:12:GLU:CA | 1:A:12:GLU:C | 1:A:13:LEU:N | 7 | 1.5 | | |
| (1,22) | 1:A:12:GLU:N | 1:A:12:GLU:CA | 1:A:12:GLU:C | 1:A:13:LEU:N | 11 | 1.5 | | |
| (1,214) | 1:A:159:ARG:C | 1:A:160:ASP:N | 1:A:160:ASP:CA | 1:A:160:ASP:C | 2 | 1.5 | | |
| (1,214) | 1:A:159:ARG:C | 1:A:160:ASP:N | 1:A:160:ASP:CA | 1:A:160:ASP:C | 4 | 1.5 | | |
| (1,199) | 1:A:146:GLU:N | 1:A:146:GLU:CA | 1:A:146:GLU:C | 1:A:147:GLY:N | 14 | 1.5 | | |
| (1,171) | 1:A:131:ASP:N | 1:A:131:ASP:CA | 1:A:131:ASP:C | 1:A:132:ARG:N | 19 | 1.5 | | |
| (1,167) | 1:A:128:LEU:N | 1:A:128:LEU:CA | 1:A:128:LEU:C | 1:A:129:ALA:N | 18 | 1.5 | | |
| (1,15) | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 5 | 1.5 | | |
| (1,83) | 1:A:82:TYR:C | 1:A:83:GLU:N | 1:A:83:GLU:CA | 1:A:83:GLU:C | 1 | 1.4 | | |
| (1,83) | 1:A:82:TYR:C | 1:A:83:GLU:N | 1:A:83:GLU:CA | 1:A:83:GLU:C | 12 | 1.4 | | |
| (1,82) | 1:A:82:TYR:N | 1:A:82:TYR:CA | 1:A:82:TYR:C | 1:A:83:GLU:N | 7 | 1.4 | | |
| (1,55) | 1:A:65:GLU:C | 1:A:66:ARG:N | 1:A:66:ARG:CA | 1:A:66:ARG:C | 12 | 1.4 | | |
| (1,35) | 1:A:27:VAL:C | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 4 | 1.4 | | |
| (1,293) | 1:A:30:PHE:CA | 1:A:30:PHE:CB | 1:A:30:PHE:CG | 1:A:30:PHE:CD1 | 3 | 1.4 | | |
| (1,28) | 1:A:21:LYS:N | 1:A:21:LYS:CA | 1:A:21:LYS:C | 1:A:22:LEU:N | 10 | 1.4 | | |
| (1,279) | 1:A:82:TYR:CA | 1:A:82:TYR:CB | 1:A:82:TYR:CG | 1:A:82:TYR:CD1 | 12 | 1.4 | | |
| (1,253) | 1:A:26:LEU:N | 1:A:26:LEU:CA | 1:A:26:LEU:C | 1:A:27:VAL:N | 17 | 1.4 | | |
| (1,251) | 1:A:181:CYS:N | 1:A:181:CYS:CA | 1:A:181:CYS:C | 1:A:182:LEU:N | 7 | 1.4 | | |
| (1,243) | 1:A:177:ILE:N | 1:A:177:ILE:CA | 1:A:177:ILE:C | 1:A:178:GLU:N | 12 | 1.4 | | |
| (1,239) | 1:A:174:GLU:C | 1:A:175:ALA:N | 1:A:175:ALA:CA | 1:A:175:ALA:C | 17 | 1.4 | | |
| (1,218) | 1:A:163:GLY:C | 1:A:164:THR:N | 1:A:164:THR:CA | 1:A:164:THR:C | 2 | 1.4 | | |
| (1,172) | 1:A:131:ASP:C | 1:A:132:ARG:N | 1:A:132:ARG:CA | 1:A:132:ARG:C | 6 | 1.4 | | |
| (1,169) | 1:A:130:LYS:N | 1:A:130:LYS:CA | 1:A:130:LYS:C | 1:A:131:ASP:N | 6 | 1.4 | | |
| (1,167) | 1:A:128:LEU:N | 1:A:128:LEU:CA | 1:A:128:LEU:C | 1:A:129:ALA:N | 12 | 1.4 | | |
| (1,86) | 1:A:84:ASP:N | 1:A:84:ASP:CA | 1:A:84:ASP:C | 1:A:85:ALA:N | 1 | 1.3 | | |
| (1,80) | 1:A:81:CYS:N | 1:A:81:CYS:CA | 1:A:81:CYS:C | 1:A:82:TYR:N | 10 | 1.3 | | |
| (1,77) | 1:A:78:GLU:C | 1:A:79:MET:N | 1:A:79:MET:CA | 1:A:79:MET:C | 1 | 1.3 | | |
| (1,77) | 1:A:78:GLU:C | 1:A:79:MET:N | 1:A:79:MET:CA | 1:A:79:MET:C | 17 | 1.3 | | |
| (1,6) | 1:A:4:TYR:N | 1:A:4:TYR:CA | 1:A:4:TYR:C | 1:A:5:LYS:N | 20 | 1.3 | | |
| (1,58) | 1:A:68:ILE:N | 1:A:68:ILE:CA | 1:A:68:ILE:C | 1:A:69:ASP:N | 2 | 1.3 | | |
| (1,57) | 1:A:67:GLY:C | 1:A:68:ILE:N | 1:A:68:ILE:CA | 1:A:68:ILE:C | 5 | 1.3 | | |
| (1,51) | 1:A:36:VAL:C | 1:A:37:ARG:N | 1:A:37:ARG:CA | 1:A:37:ARG:C | 20 | 1.3 | | |
| (1,46) | 1:A:34:HIS:N | 1:A:34:HIS:CA | 1:A:34:HIS:C | 1:A:35:VAL:N | 18 | 1.3 | | |
| (1,38) | 1:A:29:GLU:N | 1:A:29:GLU:CA | 1:A:29:GLU:C | 1:A:30:PHE:N | 18 | 1.3 | | |
| (1,35) | 1:A:27:VAL:C | 1:A:28:TYR:N | 1:A:28:TYR:CA | 1:A:28:TYR:C | 10 | 1.3 | | |
| (1,3) | 1:A:2:LEU:C | 1:A:3:ILE:N | 1:A:3:ILE:CA | 1:A:3:ILE:C | 6 | 1.3 | | |
| (1,3) | 1:A:2:LEU:C | 1:A:3:ILE:N | 1:A:3:ILE:CA | 1:A:3:ILE:C | 15 | 1.3 | | |
| (1,274) | 1:A:91:TYR:N | 1:A:91:TYR:CA | 1:A:91:TYR:CB | 1:A:91:TYR:CG | 15 | 1.3 | | |
| (1,251) $(1,252)$ | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:LEU:N | 1:A:26:LEU:CA | 1:A:26:LEU:C | 8 | 1.3 | | |
| (1,252) $(1,252)$ | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:LEU:N | 1:A:26:LEU:CA | 1:A:26:LEU:C | 12 | 1.3 | | |
| (1,252) $(1,251)$ | 1:A:181:CYS:N | 1:A:181:CYS:CA | 1:A:181:CYS:C | 1:A:182:LEU:N | 12 | 1.3 | | |
| (1,251) $(1,251)$ | 1:A:181:CYS:N | 1:A:181:CYS:CA | 1:A:181:CYS:C | 1:A:182:LEU:N | 20 | 1.3 | | |
| (1,247) | 1:A:179:GLU:N | 1:A:179:GLU:CA | 1:A:179:GLU:C | 1:A:180:LYS:N | 20 | 1.3 | | |
| (1,237) $(1,239)$ | 1:A:174:GLU:C | 1:A:175:ALA:N | 1:A:175:ALA:CA | 1:A:175:ALA:C | 13 | 1.3 | | |
| (1,233) $(1,227)$ | 1:A:168:THR:C | 1:A:169:LEU:N | 1:A:169:LEU:CA | 1:A:169:LEU:C | 5 | 1.3 | | |
| (1,224) | 1:A:167:PRO:N | 1:A:167:PRO:CA | 1:A:167:PRO:C | 1:A:168:THR:N | 5 | 1.3 | | |
| (1,224) $(1,223)$ | 1:A:166:VAL:N | 1:A:166:VAL:CA | 1:A:166:VAL:C | 1:A:167:PRO:N | 19 | 1.3 | | |
| (1,223) $(1,222)$ | 1:A:165:GLU:C | 1:A:166:VAL:N | 1:A:166:VAL:CA | 1:A:166:VAL:C | 9 | 1.3 | | |
| (1,222) $(1,22)$ | 1:A:12:GLU:N | 1:A:12:GLU:CA | 1:A:12:GLU:C | 1:A:13:LEU:N | 19 | 1.3 | | |
| (1,180) | 1:A:135:ASN:C | 1:A:136:LEU:N | 1:A:136:LEU:CA | 1:A:136:LEU:C | 20 | 1.3 | | |
| (1,100) | 1.11.100.11011.0 | 1.71.100.1100.11 | 1.11.100.DD0.OA | 1.71.100.1110.0 | | d on nert nage | | |



| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,169) | 1:A:130:LYS:N | 1:A:130:LYS:CA | 1:A:130:LYS:C | 1:A:131:ASP:N | 7 | 1.3 |
| (1,16) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:ASP:N | 2 | 1.3 |
| (1,86) | 1:A:84:ASP:N | 1:A:84:ASP:CA | 1:A:84:ASP:C | 1:A:85:ALA:N | 6 | 1.2 |
| (1,77) | 1:A:78:GLU:C | 1:A:79:MET:N | 1:A:79:MET:CA | 1:A:79:MET:C | 19 | 1.2 |
| (1,72) | 1:A:75:LYS:N | 1:A:75:LYS:CA | 1:A:75:LYS:C | 1:A:76:LEU:N | 12 | 1.2 |
| (1,57) | 1:A:67:GLY:C | 1:A:68:ILE:N | 1:A:68:ILE:CA | 1:A:68:ILE:C | 1 | 1.2 |
| (1,53) | 1:A:37:ARG:C | 1:A:38:LYS:N | 1:A:38:LYS:CA | 1:A:38:LYS:C | 17 | 1.2 |
| (1,40) | 1:A:30:PHE:N | 1:A:30:PHE:CA | 1:A:30:PHE:C | 1:A:31:LYS:N | 16 | 1.2 |
| (1,279) | 1:A:82:TYR:CA | 1:A:82:TYR:CB | 1:A:82:TYR:CG | 1:A:82:TYR:CD1 | 3 | 1.2 |
| (1,252) | 1:A:25:ASP:C | 1:A:26:LEU:N | 1:A:26:LEU:CA | 1:A:26:LEU:C | 6 | 1.2 |
| (1,249) | 1:A:180:LYS:N | 1:A:180:LYS:CA | 1:A:180:LYS:C | 1:A:181:CYS:N | 7 | 1.2 |
| (1,243) | 1:A:177:ILE:N | 1:A:177:ILE:CA | 1:A:177:ILE:C | 1:A:178:GLU:N | 5 | 1.2 |
| (1,22) | 1:A:12:GLU:N | 1:A:12:GLU:CA | 1:A:12:GLU:C | 1:A:13:LEU:N | 2 | 1.2 |
| (1,214) | 1:A:159:ARG:C | 1:A:160:ASP:N | 1:A:160:ASP:CA | 1:A:160:ASP:C | 17 | 1.2 |
| (1,213) | 1:A:158:TYR:N | 1:A:158:TYR:CA | 1:A:158:TYR:C | 1:A:159:ARG:N | 7 | 1.2 |
| (1,206) | 1:A:154:ALA:C | 1:A:155:ILE:N | 1:A:155:ILE:CA | 1:A:155:ILE:C | 12 | 1.2 |
| (1,19) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:ASP:N | 1:A:11:ASP:CA | 1:A:11:ASP:C | 3 | 1.2 |
| (1,183) | 1:A:137:ALA:N | 1:A:137:ALA:CA | 1:A:137:ALA:C | 1:A:138:PHE:N | 18 | 1.2 |
| (1,182) | 1:A:136:LEU:C | 1:A:137:ALA:N | 1:A:137:ALA:CA | 1:A:137:ALA:C | 9 | 1.2 |
| (1,180) | 1:A:135:ASN:C | 1:A:136:LEU:N | 1:A:136:LEU:CA | 1:A:136:LEU:C | 14 | 1.2 |
| (1,17) | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C | 12 | 1.2 |
| (1,17) | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C | 20 | 1.2 |
| (1,16) | 1:A:9:THR:N | 1:A:9:THR:CA | 1:A:9:THR:C | 1:A:10:ASP:N | 16 | 1.2 |
| (1,78) | 1:A:79:MET:N | 1:A:79:MET:CA | 1:A:79:MET:C | 1:A:80:ASN:N | 8 | 1.1 |
| (1,72) | 1:A:75:LYS:N | 1:A:75:LYS:CA | 1:A:75:LYS:C | 1:A:76:LEU:N | 10 | 1.1 |
| (1,70) | 1:A:74:HIS:N | 1:A:74:HIS:CA | 1:A:74:HIS:C | 1:A:75:LYS:N | 3 | 1.1 |
| (1,7) | 1:A:4:TYR:C | 1:A:5:LYS:N | 1:A:5:LYS:CA | 1:A:5:LYS:C | 5 | 1.1 |
| (1,53) | 1:A:37:ARG:C | 1:A:38:LYS:N | 1:A:38:LYS:CA | 1:A:38:LYS:C | 14 | 1.1 |
| (1,5) | 1:A:3:ILE:C | 1:A:4:TYR:N | 1:A:4:TYR:CA | 1:A:4:TYR:C | 4 | 1.1 |
| (1,4) | 1:A:3:ILE:N | 1:A:3:ILE:CA | 1:A:3:ILE:C | 1:A:4:TYR:N | 13 | 1.1 |
| (1,279) | 1:A:82:TYR:CA | 1:A:82:TYR:CB | 1:A:82:TYR:CG | 1:A:82:TYR:CD1 | 9 | 1.1 |
| (1,275) | 1:A:91:TYR:CA | 1:A:91:TYR:CB | 1:A:91:TYR:CG | 1:A:91:TYR:CD1 | 17 | 1.1 |
| (1,244) | 1:A:177:ILE:C | 1:A:178:GLU:N | 1:A:178:GLU:CA | 1:A:178:GLU:C | 2 | 1.1 |
| (1,23) | 1:A:13:LEU:C | 1:A:14:SER:N | 1:A:14:SER:CA | 1:A:14:SER:C | 11 | 1.1 |
| (1,227) | 1:A:168:THR:C | 1:A:169:LEU:N | 1:A:169:LEU:CA | 1:A:169:LEU:C | 1 | 1.1 |
| (1,216) | 1:A:160:ASP:C | 1:A:161:VAL:N | 1:A:161:VAL:CA | 1:A:161:VAL:C | 16 | 1.1 |
| (1,199) | 1:A:146:GLU:N | 1:A:146:GLU:CA | 1:A:146:GLU:C | 1:A:147:GLY:N | 19 | 1.1 |
| (1,19) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:ASP:N | 1:A:11:ASP:CA | 1:A:11:ASP:C | 1 | 1.1 |
| (1,178) | 1:A:134:LYS:C | 1:A:135:ASN:N | 1:A:135:ASN:CA | 1:A:135:ASN:C | 17 | 1.1 |
| (1,172) | 1:A:131:ASP:C | 1:A:132:ARG:N | 1:A:132:ARG:CA | 1:A:132:ARG:C | 18 | 1.1 |
| (1,167) | 1:A:128:LEU:N | 1:A:128:LEU:CA | 1:A:128:LEU:C | 1:A:129:ALA:N | 6 | 1.1 |
| (1,167) | 1:A:128:LEU:N | 1:A:128:LEU:CA | 1:A:128:LEU:C | 1:A:129:ALA:N | 16 | 1.1 |
| (1,11) | 1:A:6:ASP:C | 1:A:7:ILE:N | 1:A:7:ILE:CA | 1:A:7:ILE:C | 18 | 1.1 |

