

wwPDB NMR Structure Validation Summary Report (i)

Feb 25, 2020 – 04:39 PM CST

PDB ID : 2KCU

Title: NMR solution structure of an uncharacterized protein from Chlorobium

tepidum. Northeast Structural Genomics target CtR107

Authors: Mills, J.L.; Zhang, Q.; Sukumaran, D.K.; Wang, D.; Jiang, M.; Foote, E.L.;

Xiao, R.; Nair, R.; Everett, J.K.; Swapna, G.V.T.; Acton, T.B.; Rost, B.; Montelione, G.T.; Szyperski, T.; Northeast Structural Genomics Consortium

(NESG)

Deposited on : 2008-12-29

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

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

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

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

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)

NmrClust : Kelley et al. (1996)

MolProbity: 4.02b-467

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

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

PANAV : Wang et al. (2010)

ShiftChecker : 2.6.dev1

BMRB Restraints Analalysis : v1.2

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

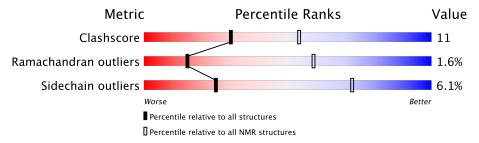
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.6.dev1

1 Overall quality at a glance (i)

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

The overall completeness of chemical shifts assignment is 52%.

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	166	74%	15%	11%



2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 20 models. Model 14 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 model	
1	A:7-A:154 (148)	1.26	14	

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

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

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

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



3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2495 atoms, of which 1218 are hydrogens and 0 are deuteriums.

• Molecule 1 is a protein called protein CtR107.

Mol	Chain	Residues			Atom	ıs			Trace
1	Λ	166	Total	С	Н	N	О	S	0
	A	166	2495	813	1218	209	248	7	U

There are 9 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	27	ALA	THR	SEE REMARK 999	UNP Q8KFZ1
A	159	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8KFZ1
A	160	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8KFZ1
A	161	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8KFZ1
A	162	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8KFZ1
A	163	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8KFZ1
A	164	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8KFZ1
A	165	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8KFZ1
A	166	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8KFZ1

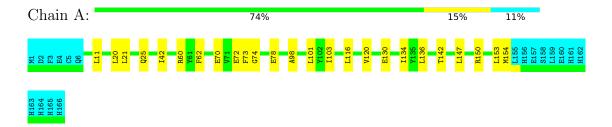


4 Residue-property plots (i)

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.

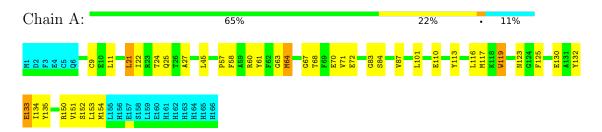
• Molecule 1: protein CtR107



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

The representative model is number 14. Colouring as in section 4.1 above.

• Molecule 1: protein CtR107





Refinement protocol and experimental data overview (i) 5



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

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

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

Software name	Classification	Version
CSI	structure solution	
TALOS	structure solution	
CYANA	structure solution	
CNS	geometry optimization	
PSVS	refinement	

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)	2kcu_nmr.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1656
Number of shifts mapped to atoms	1011
Number of unparsed shifts	199
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	446
Assignment completeness (well-defined parts)	52%

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



6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts (i)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1115	1080	1079	24±6
All	All	22300	21600	21580	476

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 11.

5 of 362 unique clashes are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom 1	Atom 2	Clash(Å)	$\mathbf{Distance}(\mathbf{\mathring{A}})$	Models	
Atom-1	Atom-1 Atom-2		Distance(A)	Worst	Total
1:A:21:LEU:HB3	1:A:74:GLY:HA3	0.90	1.42	5	3
1:A:19:ALA:HA	1:A:76:PRO:HA	0.89	1.42	11	4
1:A:120:VAL:HA	1:A:123:ASN:HD22	0.83	1.34	19	3
1:A:62:PHE:HB2	1:A:70:GLU:HB3	0.81	1.49	18	2
1:A:102:TYR:HB3	1:A:149:THR:HB	0.77	1.54	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.



\mathbf{N}	[ol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Perce	entiles
	1	A	148/166 (89%)	133±3 (90±2%)	$13\pm 3 \ (9\pm 2\%)$	2±1 (2±1%)	15	59
A	All	All	2960/3320 (89%)	2650 (90%)	264 (9%)	46 (2%)	15	59

5 of 20 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	74	GLY	11
1	A	42	ILE	5
1	A	107	GLY	5
1	A	66	ALA	4
1	A	28	MET	3

6.3.2 Protein sidechains (i)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles		
1	A	116/134 (87%)	109±2 (94±2%)	7±2 (6±2%)	25	72	
All	All	2320/2680 (87%)	2179 (94%)	141 (6%)	25	72	

5 of 57 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	21	LEU	9
1	A	78	GLU	6
1	A	136	LEU	5
1	A	89	THR	5
1	A	153	LEU	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 52% for the well-defined parts and 52% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: 2kcu_nmr.cif

Chemical shift list name: nef_chemical_shift_list_2kcu.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	1656
Number of shifts mapped to atoms	1011
Number of unparsed shifts	199
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	446
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 199) occurrences are reported below.

Shift ID	Chain Res		Type	Atom		Shift Dat	a
	Chain	nes	Type	Atom	Value	Uncertainty	Ambiguity
2	A	1	MET	HE%	2.084	0.020	1
3	A	1	MET	HE%	2.084	0.020	1
4	A	1	MET	HE%	2.084	0.020	1
5	A	1	MET	HE%	2.084	0.020	1
6	A	1	MET	HE%	2.084	0.020	1

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

• No matching atoms found in structure. First 5 (of 446) occurrences are reported below.

Chain	Pos	Type	Atom		Shift Dat	a
Chain	rtes	Type	Atom	Value	Shift Dat Uncertainty	Ambiguity
A	70	GLU	HGy	2.091	0.02	2
A	150	ARG	HB%	1.58	0.02	1



Continued from previous page...

Chain	Pag	Ттто	Atom		Shift Dat	a
Chain	nes	Туре	Atom	Value	Uncertainty	Ambiguity
A	145	ASP	HBy	2.599	0.02	2
A	127	LEU	HBy	1.704	0.02	2
A	53	PRO	HDy	3.751	0.02	2

7.1.2 Chemical shift referencing (i)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction \pm precision, ppm	Suggested action
$^{13}\mathrm{C}_{\alpha}$	156	0.12 ± 0.05	None needed ($< 0.5 \text{ ppm}$)
$^{13}C_{\beta}$	138	-0.05 ± 0.11	None needed ($< 0.5 \text{ ppm}$)
¹³ C′	0		None (insufficient data)
^{15}N	149	-0.09 ± 0.35	None needed ($< 0.5 \text{ ppm}$)

7.1.3 Completeness of resonance assignments (i)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 52%, i.e. 875 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1697. 23 out of 26 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	$^{1}\mathrm{H}$	$^{13}\mathbf{C}$	$^{15}{ m N}$
Backbone	527/720~(73%)	255/286~(89%)	139/296~(47%)	133/138 (96%)
Sidechain	284/829 (34%)	34/486 (7%)	$246/318 \ (77\%)$	4/25~(16%)
Aromatic	64/148 (43%)	29/78 (37%)	34/67~(51%)	1/3 (33%)
Overall	875/1697 (52%)	318/850 (37%)	419/681 (62%)	138/166 (83%)

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	22	ILE	HB	0.24	3.24 - 0.34	-5.4

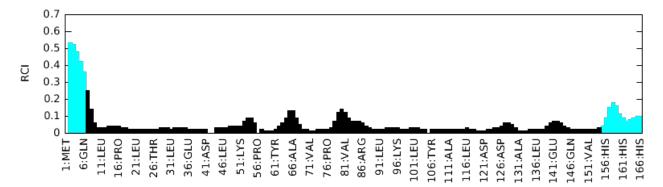
7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots (i)

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



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

Random coil index (RCI) for chain A:





8 Distance restraints analysis

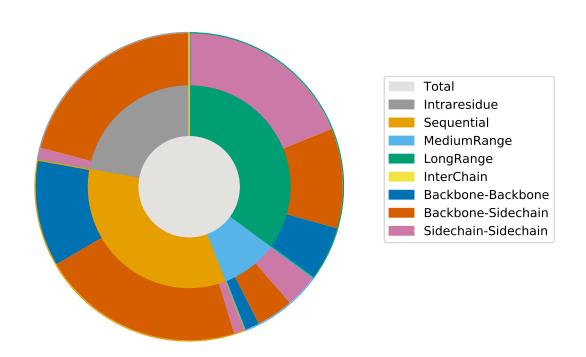
8.1 Distance restraints summary

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

Dogtoointa tumo	D D1(II4)	$\mathbf{B} ext{-}\mathbf{S}^2(\mathbf{H}^4)$	C C3(TT4)	Total		
Restraints type	$\mathbf{B}\text{-}\mathbf{B}^1(\mathbf{H}^4)$	D-S -(H -)	$S-S^3(H^4)$	$Total(H^4)$	$ m RR^{5}$	$\%^6$
Intraresidue (i-j =0)	1(0)	252(0)	15(0)	268(0)	1.7	22.2
Sequential (i-j =1)	136(0)	258(0)	14(0)	408(0)	2.6	33.7
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	19(4)	47(0)	43(0)	109(4)	0.7	9.0
Long range (i-j ≥5)	69(40)	127(0)	228(0)	424(40)	2.7	35.1
Inter chain	0(0)	0(0)	0(0)	0(0)	0.0	0.0
Total	225(44)	684(0)	300(0)	1209(44)	7.7	100.0

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

8.1.1 Pie chart: Distance restraints summary





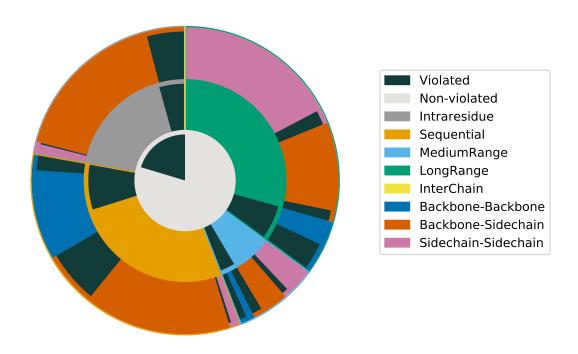
8.2 Distance violations summary

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

Doctroints true	$B-B^{1}(\%^{4})$	$B-S^2(\%^4)$	$S-S^3(\%^4)$	Total		
Restraints type	D-D (%)	D-3 (%)	S-S'(%)	$Total(\%^4)$	RR^5	$\%^6$
Intraresidue ($ i-j =0$)	1(100.0)	49(19.4)	2(13.3)	52(19.4)	0.3	21.1
Sequential (i-j =1)	21(15.4)	69(26.7)	3(21.4)	93(22.8)	0.6	37.8
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	10(52.6)	13(27.7)	8(18.6)	31(28.4)	0.2	12.6
Long range (i-j ≥5)	37(53.6)	14(11.0)	19(8.3)	70(16.5)	0.4	28.5
Inter chain	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Total	69(30.7)	145(21.2)	32(10.7)	246(20.3)	1.6	100.0

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

8.2.1 Pie-chart: Distance violations summary





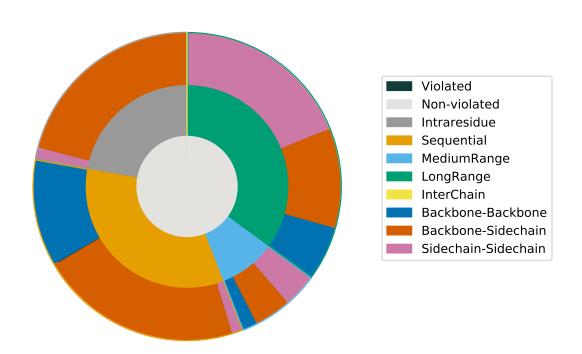
8.3 Consistent distance violations summary

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

Dogtrojeta temo	$B-B^{1}(\%^{4})$	$B-S^2(\%^4)$	$S-S^3(\%^4)$	Total		
Restraints type	D-D (%)	D-3 (%)	S-S'(%)	$Total(\%^4)$	RR^5	$\%^6$
Intraresidue (i-j =0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Sequential (i-j =1)	0(0.0)	1(0.4)	0(0.0)	1(0.2)	0.0	100.0
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Long range (i-j ≥5)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Inter chain	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Total	0(0.0)	1(0.1)	0(0.0)	1(0.1)	0.0	100.0

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

8.3.1 Pie-chart: Consistent distance violations





8.4 Residual distance violations

Violation are counted in different bin sizes and listed below

Range (Å)	No. of violated restraints per model	Max violation (Å)
0-0.2	44.3	0.2
0.2-0.5	6.2	0.5
0.5-1.0	2.1	1.0
1.0-2.0	1.6	1.92
2.0-5.0	0.1	2.06
5.0<	None	None

8.5 Distance violations in ensemble

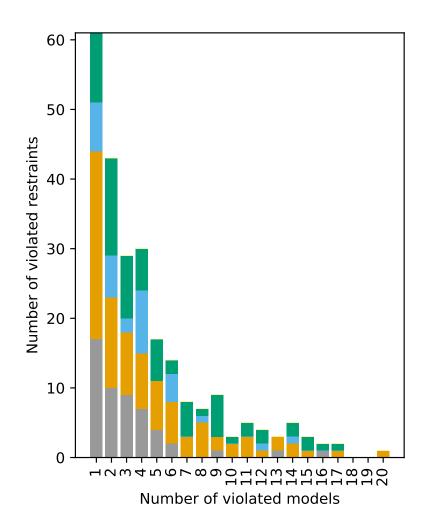
The restraints are grouped based on the number of violated models and listed here.

I	No. of	f violat	ted re	strair	nts	No. of violated models
IR^1	SQ^2	MR^3	LR^4	IC^5	Total	No. of violated models
17	27	7	10	0	61	1
10	13	6	14	0	43	2
9	9	2	9	0	29	3
7	8	9	6	0	30	4
4	7	0	6	0	17	5
2	6	4	2	0	14	6
0	3	0	5	0	8	7
0	5	1	1	0	7	8
1	2	0	6	0	9	9
0	2	0	1	0	3	10
0	3	0	2	0	5	11
0	1	1	2	0	4	12
1	2	0	0	0	3	13
0	2	1	2	0	5	14
0	1	0	2	0	3	15
1	0	0	1	0	2	16
0	1	0	1	0	2	17
0	0	0	0	0	0	18
0	0	0	0	0	0	19
0	1	0	0	0	1	20

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



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





216 intraresidue restraints, 315 sequential restraints, 78 medium range restraints,354 long range restraints and 0 inter chain restraints are not violated. There are totally 963 restrains not violated in any of the models

8.6 Violations in each model

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

Model ID		N	o. of v	iolati	ons		Mean (Å)	Max (Å)
Model ID	IR^1	SQ^2	$ m MR^3$	LR^4	IC^5	Total	Mean (A)	Max (A)
1	10	19	9	13	0	51	0.13	1.11
2	6	23	6	22	0	57	0.22	1.92
3	8	16	7	16	0	47	0.11	0.81
4	10	24	10	17	0	61	0.23	2.06
5	9	20	12	24	0	65	0.22	2.02



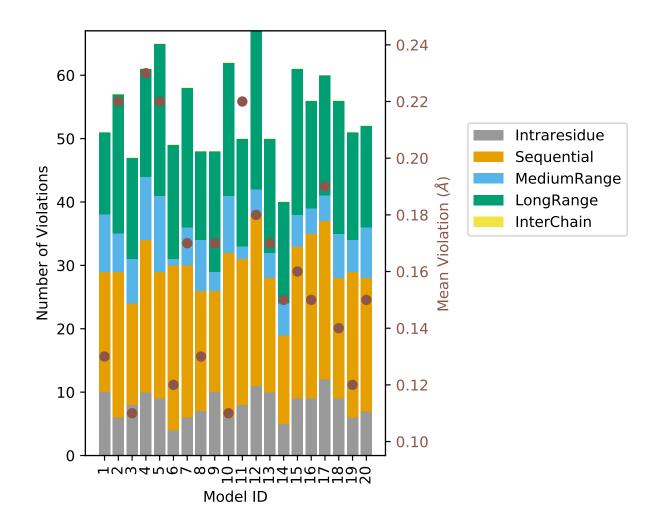
Continued from previous page...

Model ID		N	o. of v	violati	ons		Mean (Å)	Max (Å)
Wiodei 1D	IR^1	SQ^2	MR^3	LR^4	IC^5	Total	Mean (A)	Max (A)
6	4	26	1	18	0	49	0.12	1.64
7	6	24	6	22	0	58	0.17	1.77
8	7	19	8	14	0	48	0.13	1.27
9	10	16	3	19	0	48	0.17	1.77
10	6	26	9	21	0	62	0.11	0.93
11	8	23	2	17	0	50	0.22	1.81
12	11	27	4	25	0	67	0.18	1.77
13	10	18	4	18	0	50	0.17	2.06
14	5	14	5	16	0	40	0.15	1.76
15	9	24	5	23	0	61	0.16	0.88
16	9	26	4	17	0	56	0.15	1.72
17	12	25	4	19	0	60	0.19	1.85
18	9	19	7	21	0	56	0.14	1.32
19	6	23	5	17	0	51	0.12	1.19
20	7	21	8	16	0	52	0.15	1.78

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



8.6.1 Bar graph: Violations in each model

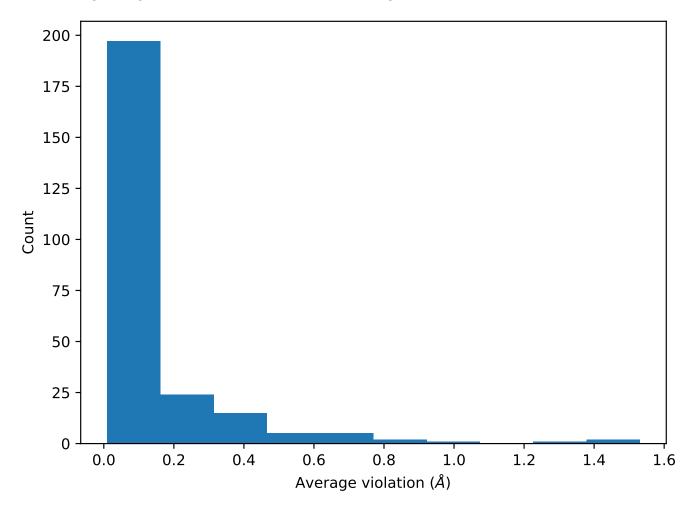




8.7 Most violated distance restraints

8.7.1 Histogram : Distribution of mean distance violation

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



8.7.2 Table: Most violated distance restraints

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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,492)	1:A:81:VAL:HB	1:A:82:GLU:H	20	0.08	0.15
(1,43)	1:A:98:ALA:O	1:A:153:LEU:H	17	0.05	0.11
(1,177)	1:A:120:VAL:HB	1:A:121:ASP:H	17	0.16	0.24
(1,285)	1:A:160:GLU:H	1:A:160:GLU:HA	16	0.08	0.13
(1,21)	1:A:62:PHE:O	1:A:70:GLU:H	16	0.05	0.1
(1,35)	1:A:61:TYR:O	1:A:131:ALA:H	15	0.05	0.1



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,25)	1:A:20:LEU:O	1:A:75:PHE:H	15	0.03	0.08
(1,143)	1:A:89:THR:HB	1:A:90:GLY:H	15	0.14	0.26
(1,41)	1:A:57:PRO:O	1:A:135:TYR:H	14	0.04	0.07
(1,387)	1:A:144:PRO:HD3	1:A:145:ASP:H	14	0.08	0.23
(1,33)	1:A:110:GLU:O	1:A:114:ASP:H	14	0.03	0.05
(1,199)	1:A:140:ALA:H	1:A:141:GLU:H	14	0.11	0.29
(1,13)	1:A:58:PHE:H	1:A:74:GLY:O	14	0.04	0.07
(1,266)	1:A:125:PHE:H	1:A:125:PHE:HB3	13	0.14	0.22
(1,123)	1:A:69:PHE:HB2	1:A:70:GLU:H	13	0.07	0.18
(1,1136)	1:A:69:PHE:HB2	1:A:70:GLU:H	13	0.3	0.41
(1,341)	1:A:127:LEU:HB2	1:A:129:GLY:H	12	0.07	0.13
(1,27)	1:A:21:LEU:O	1:A:88:VAL:H	12	0.03	0.06
(1,1173)	1:A:114:ASP:HB2	1:A:115:ALA:H	12	0.13	0.26
(1,1135)	1:A:64:MET:HG2	1:A:154:MET:H	12	0.43	0.82
(1,63)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:12:LYS:H	11	0.05	0.1
(1,184)	1:A:125:PHE:HB2	1:A:126:ASP:H	11	0.06	0.14
(1,17)	1:A:60:ARG:H	1:A:72:GLU:O	11	0.03	0.09
(1,1181)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:122:ASP:H	11	0.07	0.12
(1,1132)	1:A:60:ARG:HA	1:A:133:GLU:HG2	11	0.63	0.83
(1,410)	1:A:58:PHE:HE1	1:A:75:PHE:H	10	1.53	1.79
(1,1151)	1:A:94:SER:HB2	1:A:95:GLY:H	10	0.21	0.33
(1,1115)	1:A:51:LYS:HB2	1:A:52:SER:H	10	0.22	0.39
(1,7)	1:A:24:THR:H	1:A:71:VAL:O	9	0.06	0.15
(1,668)	1:A:39:TYR:HB3	1:A:75:PHE:HE1	9	1.45	2.06
(1,667)	1:A:39:TYR:HB2	1:A:75:PHE:HE1	9	0.76	1.53
(1,666)	1:A:131:ALA:HA	1:A:153:LEU:HB2	9	0.08	0.16
(1,556)	1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HE3	9	0.06	0.11
(1,286)	1:A:6:GLN:H	1:A:7:PHE:H	9	0.11	0.17
(1,23)	1:A:60:ARG:O	1:A:72:GLU:H	9	0.04	0.1
(1,120)	1:A:68:THR:HB	1:A:69:PHE:H	9	0.03	0.04
(1,1133)	1:A:61:TYR:HA	1:A:70:GLU:HG2	9	0.25	0.51
(1,420)	1:A:119:TRP:HE1	1:A:123:ASN:HD22	8	0.05	0.09
(1,386)	1:A:144:PRO:HD2	1:A:145:ASP:H	8	0.06	0.11
(1,371)	1:A:51:LYS:HD2	1:A:52:SER:H	8	0.05	0.08
(1,29)	1:A:19:ALA:O	1:A:90:GLY:H	8	0.03	0.05
(1,1208)	1:A:155:LEU:HB2	1:A:156:HIS:H	8	0.22	0.35
(1,1023)	1:A:10:GLU:HB2	1:A:11:LEU:H	8	0.2	0.26
(1,1013)	1:A:6:GLN:HB2	1:A:7:PHE:H	8	0.11	0.18
(1,664)	1:A:134:ILE:HB	1:A:149:THR:HA	7	0.05	0.08
(1,660)	1:A:58:PHE:HB3	1:A:132:TYR:HE1	7	0.92	1.38
(1,378)	1:A:96:LYS:HD3	1:A:97:ALA:H	7	0.08	0.13
(1,36)	1:A:61:TYR:O	1:A:131:ALA:N	7	0.02	0.03



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,15)	1:A:59:ALA:H	1:A:133:GLU:O	7	0.02	0.02
(1,1128)	1:A:53:PRO:HD2	1:A:54:SER:H	7	0.22	0.29
(1,1050)	1:A:17:VAL:HB	1:A:76:PRO:HB2	7	0.37	0.88
(1,1007)	1:A:2:ASP:HB2	1:A:3:PHE:HB2	7	0.58	0.88
(1,85)	1:A:24:THR:HB	1:A:25:GLN:H	6	0.07	0.13
(1,642)	1:A:109:ILE:HG13	1:A:113:TYR:HD1	6	0.76	1.34
(1,633)	1:A:102:TYR:HA	1:A:149:THR:HB	6	0.12	0.31
(1,417)	1:A:123:ASN:H	1:A:123:ASN:HD22	6	0.1	0.13
(1,343)	1:A:97:ALA:HA	1:A:155:LEU:H	6	0.06	0.16
(1,333)	1:A:84:SER:H	1:A:87:VAL:HB	6	0.08	0.11
(1,327)	1:A:44:GLN:HA	1:A:47:ALA:H	6	0.04	0.1
(1,1153)	1:A:96:LYS:HB2	1:A:97:ALA:H	6	0.21	0.42
(1,1143)	1:A:82:GLU:HB2	1:A:83:GLY:H	6	0.14	0.23
(1,1111)	1:A:51:LYS:H	1:A:51:LYS:HB2	6	0.17	0.23
(1,110)	1:A:51:LYS:HB2	1:A:52:SER:H	6	0.03	0.07
(1,1091)	1:A:36:GLU:HA	1:A:39:TYR:HB2	6	0.35	0.63
(1,105)	1:A:46:LEU:HB2	1:A:47:ALA:H	6	0.13	0.17
(1,1018)	1:A:9:CYS:HB2	1:A:10:GLU:H	6	0.11	0.21
(1,9)	1:A:26:THR:H	1:A:69:PHE:O	5	0.05	0.11
(1,665)	1:A:131:ALA:HA	1:A:153:LEU:HB3	5	0.06	0.08
(1,663)	1:A:120:VAL:HA	1:A:125:PHE:HB3	5	0.07	0.16
(1,657)	1:A:45:LEU:HB3	1:A:84:SER:HB3	5	0.03	0.07
(1,473)	1:A:103:ILE:H	1:A:103:ILE:HB	5	0.08	0.12
(1,385)	1:A:144:PRO:HG3	1:A:145:ASP:H	5	0.08	0.12
(1,373)	1:A:53:PRO:HG2	1:A:54:SER:H	5	0.05	0.15
(1,318)	1:A:129:GLY:H	1:A:130:GLU:H	5	0.06	0.14
(1,288)	1:A:13:GLU:H	1:A:14:LEU:H	5	0.02	0.03
(1,248)	1:A:101:LEU:H	1:A:101:LEU:HB2	5	0.04	0.05
(1,22)	1:A:62:PHE:O	1:A:70:GLU:N	5	0.02	0.02
(1,216)	1:A:159:LEU:H	1:A:160:GLU:H	5	0.09	0.18
(1,202)	1:A:142:THR:HA	1:A:143:ALA:H	5	0.05	0.07
(1,198)	1:A:139:PRO:HB3	1:A:140:ALA:H	5	0.03	0.07
(1,1114)	1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HE2	5	0.23	0.29
(1,1113)	1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HD2	5	0.42	0.51
(1,1109)	1:A:49:GLN:HE21	1:A:82:GLU:HB2	5	0.54	1.27
(1,90)	1:A:28:MET:H	1:A:29:SER:H	4	0.22	0.26
(1,638)	1:A:58:PHE:HB2	1:A:132:TYR:HE1	4	0.56	1.42
(1,630)	1:A:109:ILE:HG12	1:A:113:TYR:HD1	4	1.33	1.92
(1,60)	1:A:10:GLU:HB2	1:A:11:LEU:H	4	0.03	0.04
(1,553)	1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HE2	4	0.1	0.13
(1,42)	1:A:57:PRO:O	1:A:135:TYR:N	4	0.01	0.02
(1,374)	1:A:53:PRO:HG3	1:A:54:SER:H	4	0.04	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,357)	1:A:49:GLN:H	1:A:51:LYS:H	4	0.03	0.04
(1,355)	1:A:140:ALA:H	1:A:142:THR:H	4	0.06	0.14
(1,342)	1:A:127:LEU:HB3	1:A:129:GLY:H	4	0.02	0.02
(1,328)	1:A:47:ALA:HA	1:A:51:LYS:H	4	0.04	0.07
(1,273)	1:A:142:THR:H	1:A:142:THR:HB	4	0.09	0.18
(1,243)	1:A:64:MET:H	1:A:64:MET:HB3	4	0.02	0.06
(1,229)	1:A:31:LEU:H	1:A:31:LEU:HB3	4	0.04	0.06
(1,219)	1:A:6:GLN:H	1:A:6:GLN:HB3	4	0.12	0.14
(1,201)	1:A:141:GLU:HB3	1:A:142:THR:H	4	0.08	0.15
(1,14)	1:A:58:PHE:N	1:A:74:GLY:O	4	0.04	0.05
(1,1206)	1:A:154:MET:HB2	1:A:159:LEU:H	4	0.52	0.97
(1,1194)	1:A:141:GLU:HB2	1:A:142:THR:H	4	0.1	0.13
(1,1191)	1:A:138:ASN:HB2	1:A:141:GLU:HG2	4	0.45	0.63
(1,1177)	1:A:118:LYS:HA	1:A:121:ASP:HB2	4	0.26	0.32
(1,1165)	1:A:109:ILE:HG12	1:A:113:TYR:HE1	4	1.07	2.06
(1,1147)	1:A:83:GLY:HA2	1:A:89:THR:H	4	0.18	0.24
(1,1138)	1:A:70:GLU:HG2	1:A:71:VAL:HA	4	0.1	0.19
(1,1121)	1:A:52:SER:H	1:A:52:SER:HB2	4	0.08	0.11
(1,11)	1:A:43:LEU:O	1:A:47:ALA:H	4	0.02	0.03
(1,1038)	1:A:13:GLU:HB2	1:A:14:LEU:H	4	0.11	0.13
(1,1031)	1:A:12:LYS:HB2	1:A:13:GLU:H	4	0.05	0.07
(1,1027)	1:A:12:LYS:H	1:A:12:LYS:HB2	4	0.14	0.22
(1,1019)	1:A:9:CYS:HB2	1:A:100:SER:HA	4	0.26	0.4
(1,8)	1:A:24:THR:N	1:A:71:VAL:O	3	0.02	0.02
(1,641)	1:A:7:PHE:HE1	1:A:102:TYR:HE1	3	0.87	1.32
(1,612)	1:A:96:LYS:HG3	1:A:97:ALA:H	3	0.03	0.05
(1,551)	1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HD2	3	0.02	0.02
(1,506)	1:A:25:GLN:HA	1:A:26:THR:HB	3	0.07	0.11
(1,5)	1:A:21:LEU:H	1:A:88:VAL:O	3	0.02	0.03
(1,477)	1:A:118:LYS:H	1:A:118:LYS:HB2	3	0.14	0.15
(1,470)	1:A:31:LEU:H	1:A:31:LEU:HB2	3	0.06	0.08
(1,467)	1:A:11:LEU:H	1:A:11:LEU:HB2	3	0.21	0.27
(1,465)	1:A:7:PHE:H	1:A:7:PHE:HB3	3	0.11	0.13
(1,44)	1:A:98:ALA:O	1:A:153:LEU:N	3	0.01	0.02
(1,419)	1:A:119:TRP:HE1	1:A:123:ASN:HD21	3	0.12	0.17
(1,377)	1:A:96:LYS:HD2	1:A:97:ALA:H	3	0.06	0.11
(1,351)	1:A:10:GLU:H	1:A:99:SER:H	3	0.03	0.04
(1,346)	1:A:26:THR:H	1:A:69:PHE:H	3	0.03	0.05
(1,324)	1:A:27:ALA:H	1:A:30:GLU:HB3	3	0.05	0.1
(1,320)	1:A:145:ASP:H	1:A:146:GLN:H	3	0.08	0.12
(1,292)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:LEU:H	3	0.04	0.07
(1,214)	1:A:155:LEU:HB3	1:A:156:HIS:H	3	0.1	0.17



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,135)	1:A:82:GLU:H	1:A:83:GLY:H	3	0.03	0.06
(1,1209)	1:A:156:HIS:H	1:A:156:HIS:HB2	3	0.32	0.4
(1,1204)	1:A:153:LEU:H	1:A:153:LEU:HB2	3	0.03	0.04
(1,1193)	1:A:141:GLU:H	1:A:141:GLU:HB2	3	0.08	0.12
(1,1168)	1:A:110:GLU:H	1:A:110:GLU:HB2	3	0.22	0.26
(1,1150)	1:A:93:PRO:HB2	1:A:94:SER:H	3	0.18	0.22
(1,1124)	1:A:53:PRO:HB2	1:A:75:PHE:HB2	3	0.42	0.77
(1,111)	1:A:51:LYS:HB3	1:A:52:SER:H	3	0.04	0.05
(1,1095)	1:A:45:LEU:HB2	1:A:84:SER:HB2	3	0.23	0.31
(1,1042)	1:A:14:LEU:HB2	1:A:94:SER:H	3	0.38	0.62
(1,662)	1:A:120:VAL:HA	1:A:125:PHE:HB2	2	0.08	0.09
(1,621)	1:A:2:ASP:HB2	1:A:3:PHE:HB3	2	0.09	0.1
(1,572)	1:A:96:LYS:HA	1:A:96:LYS:HE3	2	0.06	0.07
(1,517)	1:A:28:MET:HA	1:A:30:GLU:H	2	0.06	0.08
(1,50)	1:A:6:GLN:HB3	1:A:7:PHE:H	2	0.05	0.09
(1,493)	1:A:82:GLU:HB2	1:A:83:GLY:H	2	0.06	0.08
(1,491)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:79:GLY:H	2	0.01	0.02
(1,48)	1:A:6:GLN:HA	1:A:7:PHE:H	2	0.08	0.08
(1,47)	1:A:4:GLU:HA	1:A:5:CYS:H	2	0.06	0.09
(1,372)	1:A:51:LYS:HD3	1:A:52:SER:H	2	0.04	0.05
(1,37)	1:A:132:TYR:H	1:A:152:SER:O	2	0.02	0.03
(1,360)	1:A:84:SER:H	1:A:87:VAL:H	2	0.04	0.04
(1,331)	1:A:53:PRO:HB3	1:A:55:GLY:H	2	0.03	0.03
(1,329)	1:A:46:LEU:HA	1:A:51:LYS:H	2	0.08	0.09
(1,323)	1:A:27:ALA:H	1:A:30:GLU:HB2	2	0.03	0.05
(1,322)	1:A:149:THR:H	1:A:150:ARG:H	2	0.03	0.03
(1,31)	1:A:12:LYS:O	1:A:97:ALA:H	2	0.03	0.05
(1,302)	1:A:67:GLY:H	1:A:68:THR:H	2	0.09	0.1
(1,3)	1:A:19:ALA:H	1:A:90:GLY:O	2	0.02	0.03
(1,283)	1:A:156:HIS:H	1:A:156:HIS:HB2	2	0.18	0.19
(1,28)	1:A:21:LEU:O	1:A:88:VAL:N	2	0.01	0.02
(1,26)	1:A:20:LEU:O	1:A:75:PHE:N	2	0.02	0.03
(1,249)	1:A:101:LEU:H	1:A:101:LEU:HB3	2	0.04	0.05
(1,244)	1:A:68:THR:H	1:A:68:THR:HB	2	0.1	0.12
(1,220)	1:A:7:PHE:H	1:A:7:PHE:HB2	2	0.03	0.05
(1,217)	1:A:160:GLU:HA	1:A:161:HIS:H	2	0.06	0.06
(1,213)	1:A:155:LEU:HB2	1:A:156:HIS:H	2	0.04	0.08
(1,19)	1:A:61:TYR:H	1:A:131:ALA:O	2	0.01	0.02
(1,1202)	1:A:146:GLN:H	1:A:147:LEU:HB2	2	0.69	0.79
(1,1201)	1:A:146:GLN:H	1:A:146:GLN:HB2	2	0.05	0.06
(1,1200)	1:A:145:ASP:H	1:A:145:ASP:HB2	2	0.03	0.06
(1,1185)	1:A:125:PHE:HB3	1:A:155:LEU:HB2	2	0.4	0.4



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1179)	1:A:118:LYS:HG2	1:A:121:ASP:HB2	2	0.21	0.33
(1,1175)	1:A:116:LEU:HA	1:A:119:TRP:HB2	2	0.2	0.3
(1,1152)	1:A:96:LYS:H	1:A:96:LYS:HB2	2	0.14	0.18
(1,1119)	1:A:51:LYS:HE2	1:A:81:VAL:HG11	2	0.11	0.13
(1,1119)	1:A:51:LYS:HE2	1:A:81:VAL:HG12	2	0.11	0.13
(1,1119)	1:A:51:LYS:HE2	1:A:81:VAL:HG13	2	0.11	0.13
(1,1097)	1:A:45:LEU:HB3	1:A:84:SER:HB2	2	0.04	0.07
(1,1094)	1:A:40:HIS:HB2	1:A:41:ASP:H	2	0.04	0.04
(1,1093)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB2	2	0.08	0.1
(1,1040)	1:A:13:GLU:HG2	1:A:96:LYS:HG2	2	0.73	1.1
(1,1014)	1:A:7:PHE:H	1:A:7:PHE:HB2	2	0.19	0.21
(1,10)	1:A:26:THR:N	1:A:69:PHE:O	2	0.02	0.03
(1,1)	1:A:14:LEU:H	1:A:95:GLY:O	2	0.01	0.01
(1,94)	1:A:31:LEU:HB3	1:A:32:GLY:H	1	0.01	0.01
(1,927)	1:A:132:TYR:HE1	1:A:134:ILE:HD11	1	0.02	0.02
(1,927)	1:A:132:TYR:HE1	1:A:134:ILE:HD12	1	0.02	0.02
(1,927)	1:A:132:TYR:HE1	1:A:134:ILE:HD13	1	0.02	0.02
(1,74)	1:A:18:PRO:HB3	1:A:19:ALA:H	1	0.02	0.02
(1,655)	1:A:35:PHE:HE1	1:A:73:PHE:HE1	1	0.53	0.53
(1,649)	1:A:135:TYR:HE1	1:A:149:THR:HB	1	0.09	0.09
(1,636)	1:A:11:LEU:HG	1:A:119:TRP:HH2	1	0.04	0.04
(1,632)	1:A:125:PHE:HB3	1:A:155:LEU:HG	1	0.02	0.02
(1,615)	1:A:108:GLU:HG3	1:A:109:ILE:H	1	0.05	0.05
(1,614)	1:A:108:GLU:HG2	1:A:109:ILE:H	1	0.11	0.11
(1,6)	1:A:21:LEU:N	1:A:88:VAL:O	1	0.02	0.02
(1,599)	1:A:25:GLN:HG2	1:A:26:THR:H	1	0.15	0.15
(1,598)	1:A:23:ARG:HG3	1:A:24:THR:H	1	0.02	0.02
(1,597)	1:A:23:ARG:HG2	1:A:24:THR:H	1	0.01	0.01
(1,596)	1:A:13:GLU:HG3	1:A:14:LEU:H	1	0.06	0.06
(1,570)	1:A:96:LYS:HB2	1:A:96:LYS:HE2	1	0.01	0.01
(1,569)	1:A:96:LYS:HA	1:A:96:LYS:HE2	1	0.31	0.31
(1,566)	1:A:96:LYS:HA	1:A:96:LYS:HD2	1	0.01	0.01
(1,565)	1:A:96:LYS:H	1:A:96:LYS:HD2	1	0.05	0.05
(1,557)	1:A:51:LYS:HB2	1:A:51:LYS:HE3	1	0.01	0.01
(1,525)	1:A:31:LEU:HA	1:A:34:LEU:HB2	1	0.02	0.02
(1,509)	1:A:118:LYS:HA	1:A:121:ASP:HB2	1	0.01	0.01
(1,504)	1:A:144:PRO:HB3	1:A:145:ASP:H	1	0.02	0.02
(1,49)	1:A:6:GLN:HB2	1:A:7:PHE:H	1	0.01	0.01
(1,488)	1:A:69:PHE:HB3	1:A:70:GLU:H	1	0.03	0.03
(1,474)	1:A:112:VAL:H	1:A:112:VAL:HB	1	0.21	0.21
(1,46)	1:A:3:PHE:HA	1:A:4:GLU:H	1	0.01	0.01
(1,4)	1:A:19:ALA:N	1:A:90:GLY:O	1	0.01	0.01



Continued from previous page...

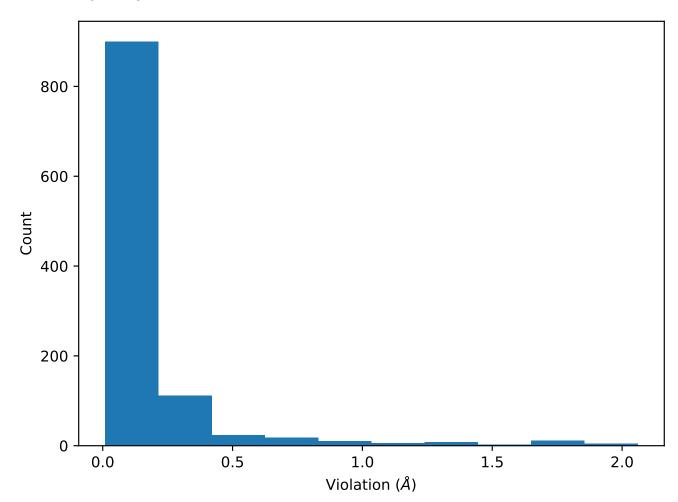
Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,39)	1:A:59:ALA:O	1:A:133:GLU:H	1	0.02	0.02
(1,388)	1:A:150:ARG:HG2	1:A:151:VAL:H	1	0.02	0.02
(1,384)	1:A:144:PRO:HG2	1:A:145:ASP:H	1	0.04	0.04
(1,368)	1:A:25:GLN:HG3	1:A:26:THR:H	1	0.05	0.05
(1,352)	1:A:104:GLY:H	1:A:147:LEU:H	1	0.08	0.08
(1,34)	1:A:110:GLU:O	1:A:114:ASP:N	1	0.01	0.01
(1,325)	1:A:31:LEU:HA	1:A:34:LEU:H	1	0.02	0.02
(1,321)	1:A:146:GLN:H	1:A:147:LEU:H	1	0.02	0.02
(1,319)	1:A:141:GLU:H	1:A:142:THR:H	1	0.01	0.01
(1,272)	1:A:141:GLU:H	1:A:141:GLU:HB3	1	0.11	0.11
(1,267)	1:A:127:LEU:H	1:A:127:LEU:HB2	1	0.02	0.02
(1,265)	1:A:125:PHE:H	1:A:125:PHE:HB2	1	0.05	0.05
(1,261)	1:A:122:ASP:H	1:A:122:ASP:HB2	1	0.09	0.09
(1,257)	1:A:118:LYS:H	1:A:118:LYS:HB3	1	0.03	0.03
(1,251)	1:A:110:GLU:H	1:A:110:GLU:HB2	1	0.01	0.01
(1,173)	1:A:114:ASP:HB2	1:A:115:ALA:H	1	0.04	0.04
(1,150)	1:A:93:PRO:HB3	1:A:94:SER:H	1	0.01	0.01
(1,149)	1:A:93:PRO:HB2	1:A:94:SER:H	1	0.01	0.01
(1,141)	1:A:88:VAL:HB	1:A:89:THR:H	1	0.03	0.03
(1,138)	1:A:84:SER:HA	1:A:85:GLY:H	1	0.08	0.08
(1,1203)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HB2	1	0.15	0.15
(1,1190)	1:A:138:ASN:H	1:A:138:ASN:HB2	1	0.12	0.12
(1,1182)	1:A:122:ASP:H	1:A:122:ASP:HB2	1	0.33	0.33
(1,1159)	1:A:101:LEU:HB2	1:A:136:LEU:HD11	1	0.36	0.36
(1,1159)	1:A:101:LEU:HB2	1:A:136:LEU:HD12	1	0.36	0.36
(1,1159)	1:A:101:LEU:HB2	1:A:136:LEU:HD13	1	0.36	0.36
(1,1157)	1:A:100:SER:HB2	1:A:116:LEU:HA	1	0.39	0.39
(1,1142)	1:A:82:GLU:H	1:A:82:GLU:HB2	1	0.05	0.05
(1,114)	1:A:54:SER:H	1:A:55:GLY:H	1	0.01	0.01
(1,1123)	1:A:53:PRO:HB2	1:A:55:GLY:H	1	0.1	0.1
(1,1122)	1:A:53:PRO:HB2	1:A:54:SER:H	1	0.06	0.06
(1,1088)	1:A:34:LEU:HB2	1:A:35:PHE:H	1	0.08	0.08
(1,1081)	1:A:31:LEU:HA	1:A:34:LEU:HB2	1	0.41	0.41
(1,108)	1:A:48:GLY:H	1:A:49:GLN:H	1	0.06	0.06
(1,1011)	1:A:6:GLN:H	1:A:6:GLN:HB2	1	0.13	0.13
(1,1009)	1:A:2:ASP:HB3	1:A:3:PHE:HB3	1	0.12	0.12



8.8 All distance violations

8.8.1 Histogram : Distribution of distance violations

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



8.8.2 Table: All distance violations

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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,668)	1:A:39:TYR:HB3	1:A:75:PHE:HE1	13	2.06
(1,1165)	1:A:109:ILE:HG12	1:A:113:TYR:HE1	4	2.06
(1,1165)	1:A:109:ILE:HG12	1:A:113:TYR:HE1	5	2.02
(1,668)	1:A:39:TYR:HB3	1:A:75:PHE:HE1	2	1.92
(1,630)	1:A:109:ILE:HG12	1:A:113:TYR:HD1	4	1.92
(1,668)	1:A:39:TYR:HB3	1:A:75:PHE:HE1	17	1.85
(1,668)	1:A:39:TYR:HB3	1:A:75:PHE:HE1	11	1.81



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

$\begin{array}{c cccc} \hline (1,410) & 1 \\ \hline (1,668) & 1 \\ \hline (1,410) & 1 \\ \hline (1,410) & 1 \\ \hline (1,410) & 1 \\ \hline (1,668) & 1 \\ \hline (1,630) & 1 \\ \hline (1,410) & 1 \\ \hline \end{array}$	L:A:58:PHE:HE1 L:A:58:PHE:HE1 L:A:39:TYR:HB3 L:A:58:PHE:HE1 L:A:58:PHE:HE1 L:A:58:PHE:HE1 L:A:39:TYR:HB3 L:A:109:ILE:HG12 L:A:58:PHE:HE1	1:A:75:PHE:H 1:A:75:PHE:H 1:A:75:PHE:HE1 1:A:75:PHE:H 1:A:75:PHE:H 1:A:75:PHE:H 1:A:75:PHE:HE1 1:A:75:PHE:HE1	11 20 12 7 9 14 16	1.79 1.78 1.77 1.77 1.77 1.76
$\begin{array}{c cc} \hline (1,668) & 1 \\ \hline (1,410) & 1 \\ \hline (1,410) & 1 \\ \hline (1,410) & 1 \\ \hline (1,668) & 1 \\ \hline (1,630) & 1 \\ \hline (1,410) & 1 \\ \hline \end{array}$:A:39:TYR:HB3 :A:58:PHE:HE1 :A:58:PHE:HE1 :A:58:PHE:HE1 :A:39:TYR:HB3 :A:109:ILE:HG12 :A:58:PHE:HE1	1:A:75:PHE:HE1 1:A:75:PHE:H 1:A:75:PHE:H 1:A:75:PHE:H 1:A:75:PHE:HE1	12 7 9 14	1.77 1.77 1.77
$ \begin{array}{c cccc} \hline (1,410) & 1 \\ \hline (1,410) & 1 \\ \hline (1,410) & 1 \\ \hline (1,668) & 1 \\ \hline (1,630) & 1 \\ \hline (1,410) & 1 \\ \hline \end{array} $:A:58:PHE:HE1 :A:58:PHE:HE1 :A:58:PHE:HE1 :A:39:TYR:HB3 :A:109:ILE:HG12 !:A:58:PHE:HE1	1:A:75:PHE:H 1:A:75:PHE:H 1:A:75:PHE:H 1:A:75:PHE:HE1	7 9 14	1.77 1.77
$ \begin{array}{c ccc} \hline (1,410) & 1 \\ \hline (1,410) & 1 \\ \hline (1,668) & 1 \\ \hline (1,630) & 1 \\ \hline (1,410) & 1 \\ \hline \end{array} $	1:A:58:PHE:HE1 1:A:58:PHE:HE1 1:A:39:TYR:HB3 1:A:109:ILE:HG12 1:A:58:PHE:HE1	1:A:75:PHE:H 1:A:75:PHE:H 1:A:75:PHE:HE1	9 14	1.77
$\begin{array}{c cc} \hline (1,410) & 1 \\ \hline (1,668) & 1 \\ \hline (1,630) & 1: \\ \hline (1,410) & 1 \end{array}$:A:58:PHE:HE1 :A:39:TYR:HB3 :A:109:ILE:HG12 I:A:58:PHE:HE1	1:A:75:PHE:H 1:A:75:PHE:HE1	14	
(1,668) 1 (1,630) 1: (1,410) 1	:A:39:TYR:HB3 :A:109:ILE:HG12 I:A:58:PHE:HE1	1:A:75:PHE:HE1		1.76
(1,630) 1: $(1,410)$ 1	:A:109:ILE:HG12 I:A:58:PHE:HE1		16	1
(1,410) 1	1:A:58:PHE:HE1	1:A:113:TYR:HD1	10	1.72
() /			5	1.7
(1./110) 1		1:A:75:PHE:H	17	1.66
(1,±10) 1	l:A:58:PHE:HE1	1:A:75:PHE:H	2	1.65
(1,410) 1	L:A:58:PHE:HE1	1:A:75:PHE:H	6	1.64
(1,667) 1	:A:39:TYR:HB2	1:A:75:PHE:HE1	12	1.53
(1,638) 1	:A:58:PHE:HB2	1:A:132:TYR:HE1	2	1.42
(1,660) 1	L:A:58:PHE:HB3	1:A:132:TYR:HE1	4	1.38
(1,667) 1	:A:39:TYR:HB2	1:A:75:PHE:HE1	13	1.36
(1,668) 1	:A:39:TYR:HB3	1:A:75:PHE:HE1	5	1.35
(1,642) 1:	:A:109:ILE:HG13	1:A:113:TYR:HD1	4	1.34
(1,641)	1:A:7:PHE:HE1	1:A:102:TYR:HE1	18	1.32
(1,660) 1	1:A:58:PHE:HB3	1:A:132:TYR:HE1	8	1.27
(1,1109) 1:	:A:49:GLN:HE21	1:A:82:GLU:HB2	16	1.27
(1,410) 1	1:A:58:PHE:HE1	1:A:75:PHE:H	18	1.2
(1,660) 1	1:A:58:PHE:HB3	1:A:132:TYR:HE1	19	1.19
(1,660) 1	1:A:58:PHE:HB3	1:A:132:TYR:HE1	1	1.11
(1,1040) 1	:A:13:GLU:HG2	1:A:96:LYS:HG2	12	1.1
(1,630) 1:	:A:109:ILE:HG12	1:A:113:TYR:HD1	7	1.07
(1,660) 1	1:A:58:PHE:HB3	1:A:132:TYR:HE1	12	1.04
(1,642) 1:	:A:109:ILE:HG13	1:A:113:TYR:HD1	5	1.03
(1,1109) 1:	:A:49:GLN:HE21	1:A:82:GLU:HB2	9	1.03
(1,667) 1	:A:39:TYR:HB2	1:A:75:PHE:HE1	11	1.01
(1,641)	1:A:7:PHE:HE1	1:A:102:TYR:HE1	11	1.0
(1,1206) 1:	:A:154:MET:HB2	1:A:159:LEU:H	4	0.97
(' /	:A:109:ILE:HG13	1:A:113:TYR:HD1	10	0.93
	1:A:17:VAL:HB	1:A:76:PRO:HB2	7	0.88
· · /	1:A:2:ASP:HB2	1:A:3:PHE:HB2	15	0.88
	:A:39:TYR:HB2	1:A:75:PHE:HE1	16	0.87
(' /	1:A:2:ASP:HB2	1:A:3:PHE:HB2	5	0.86
(' /	1:A:60:ARG:HA	1:A:133:GLU:HG2	12	0.83
· · /	:A:64:MET:HG2	1:A:154:MET:H	1	0.82
('	:A:109:ILE:HG13	1:A:113:TYR:HD1	20	0.81
/	1:A:60:ARG:HA	1:A:133:GLU:HG2	10	0.81
· · /	1:A:2:ASP:HB2	1:A:3:PHE:HB2	3	0.81
() /	1:A:60:ARG:HA	1:A:133:GLU:HG2	17	0.8



Continued from previous page...

(1,1202) 1:A:146:GLN:H 1:A:147:LEU:HB2 12 0.79 (1,1132) 1:A:60:ARG:HA 1:A:133:GLU:HG2 1 0.77 (1,1132) 1:A:60:ARG:HA 1:A:133:GLU:HG2 20 0.77 (1,1124) 1:A:53:PRO:HB2 1:A:75:PHE:HB2 9 0.77 (1,667) 1:A:39:TYR:HB2 1:A:75:PHE:HB1 2 0.76 (1,1132) 1:A:60:ARG:HA 1:A:133:GLU:HG2 4 0.76 (1,1132) 1:A:60:ARG:HA 1:A:133:GLU:HG2 5 0.76 (1,1132) 1:A:60:ARG:HA 1:A:133:GLU:HG2 5 0.76 (1,1132) 1:A:60:ARG:HA 1:A:133:GLU:HG2 7 0.72 (1,1050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PRO:HB2 14 0.67 (1,1050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PRO:HB2 14 0.67 (1,630) 1:A:133:SASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 15 0.63 (1,1191) 1:A:34:MET:HG2 1:A:34:MET:H 3 0.62 (1,1042) 1:A:14:GLU:HB2 1:A:35:MET:HB	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1132)	(1,1202)	1:A:146:GLN:H	1:A:147:LEU:HB2	12	0.79
(1,1124) 1:A:53:PRO:HB2 1:A:75:PHE:HB2 9 0.77 (1,667) 1:A:39:TYR:HB2 1:A:75:PHE:HB1 2 0.76 (1,1132) 1:A:60:ARG:HA 1:A:133:GLU:HG2 4 0.76 (1,1132) 1:A:60:ARG:HA 1:A:133:GLU:HG2 5 0.76 (1,1132) 1:A:60:ARG:HA 1:A:133:GLU:HG2 7 0.72 (1,1132) 1:A:60:ARG:HA 1:A:133:GLU:HG2 7 0.72 (1,1050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:13:TYR:HD1 2 0.63 (1,630) 1:A:109:ILE:HG12 1:A:13:TYR:HD1 2 0.63 (1,1191) 1:A:38:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 15 0.63 (1,1191) 1:A:36:GLU:HA 1:A:39:TYR:HB2 5 0.63 (1,1192) 1:A:14:GLU:HB2 1:A:14:GLU:HB2 1 0.62 (1,1042) 1:A:14:GEU:HB2 1:A:14:GLU:HB2 2 0.58 (1,1191) 1:A:38:ASN:HB2 1:A:75:PHE:HB1 17 0.55 (1,1007) 1:A:39:TYR:HB2 1:A:75:PHE:HB1	(1,1132)	1:A:60:ARG:HA	1:A:133:GLU:HG2	1	0.77
(1,667)	(1,1132)	1:A:60:ARG:HA	1:A:133:GLU:HG2	20	0.77
(1,1132) 1:A:60:ARG:HA 1:A:133:GLU:HG2 4 0.76 (1,1132) 1:A:60:ARG:HA 1:A:133:GLU:HG2 5 0.76 (1,1132) 1:A:60:ARG:HA 1:A:133:GLU:HG2 7 0.72 (1,1050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PRO:HB2 14 0.67 (1,630) 1:A:10:IE:HG12 1:A:13:TYR:HD1 2 0.63 (1,1191) 1:A:36:GLU:HA 1:A:39:TYR:HB2 5 0.63 (1,1091) 1:A:36:GLU:HA 1:A:39:TYR:HB2 5 0.63 (1,1091) 1:A:36:GLU:HA 1:A:39:TYR:HB2 5 0.63 (1,1042) 1:A:14:LEU:HB2 1:A:94:SER:H 17 0.62 (1,1042) 1:A:14:GEU:HB2 1:A:39:TYR:HB2 2 0.58 (1,1042) 1:A:14:GEU:HB2 1:A:39:TYR:HB2 1:A:75:PHE:HB1 17 0.56 (1,1092) 1:A:14:G:LU:HB2 1:A:75:PHE:HB1 17 0.55 (1,1091) 1:A:36:GLU:HA 1:A:39:TYR:HB2 10.55 (1,1007) 1:A:36:GLU:HA 1:A:3	(1,1124)	1:A:53:PRO:HB2	1:A:75:PHE:HB2	9	0.77
(1,1132) 1:A:60:ARG:HA 1:A:133:GLU:HG2 5 0.76 (1,1132) 1:A:60:ARG:HA 1:A:133:GLU:HG2 7 0.72 (1,050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PRO:HB2 14 0.67 (1,630) 1:A:109:ILE:HG12 1:A:13:TYR:HD1 2 0.63 (1,1191) 1:A:38:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 15 0.63 (1,1091) 1:A:36:GLU:HA 1:A:39:TYR:HB2 5 0.63 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 3 0.62 (1,1042) 1:A:14:LEU:HB2 1:A:94:SER:H 17 0.62 (1,1202) 1:A:146:GLN:H 1:A:147:DEU:HB2 2 0.58 (1,1191) 1:A:338:ASN:HB2 1:A:75:PHE:HE1 17 0.56 (1,667) 1:A:39:TYR:HB2 1:A:39:TYR:HB2 10.55 (1,1001) 1:A:36:GLU:HA 1:A:39:TYR:HB2 10.55 (1,1001) 1:A:36:GLU:HA 1:A:39:TYR:HB2 10.55 (1,1000) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PHE:HB1 17 0.55 (1,1007)	(1,667)	1:A:39:TYR:HB2	1:A:75:PHE:HE1	2	0.76
(1,1132) 1:A:60:ARG:HA 1:A:133:GLU:HG2 7 0.72 (1,1050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PRO:HB2 14 0.67 (1,630) 1:A:109:ILE:HG12 1:A:113:TYR:HD1 2 0.63 (1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 15 0.63 (1,1191) 1:A:36:GLU:HA 1:A:39:TYR:HB2 5 0.63 (1,1191) 1:A:36:GLU:HA 1:A:39:TYR:HB2 5 0.63 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 3 0.62 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 3 0.62 (1,1042) 1:A:146:GLN:H 1:A:147:LEU:HB2 2 0.58 (1,1191) 1:A:38:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 14 0.56 (1,667) 1:A:39:TYR:HB2 1:A:75:PHE:HE1 17 0.55 (1,1091) 1:A:36:GLU:HA 1:A:39:TYR:HB2 10 0.55 (1,1007) 1:A:2:ASP:HB2 1:A:3PHE:HB2 2 0.55 (1,1007) 1:A:2:ASP:HB2 1:A:76:PRO:HB2 20 0.54 (1,655) 1:A:35:PHE:HE1 1:A:76:PRO:HB2 20 0.54 (1,638) 1:A:58:PHE:HB1 1:A:76:PRO:HB2 20 0.54 (1,638) 1:A:58:PHE:HB2 1:A:132:TYR:HB1 7 0.52 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 11 0.53 (1,638) 1:A:38:SPHE:HB2 1:A:132:TYR:HB1 7 0.52 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 15 0.51 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 15 0.48 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 15 0.42 (1,1155) 1:A:64:MET:H	(1,1132)	1:A:60:ARG:HA	1:A:133:GLU:HG2	4	0.76
(1,1050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PRO:HB2 14 0.67 (1,630) 1:A:109:ILE:HG12 1:A:113:TYR:HD1 2 0.63 (1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 15 0.63 (1,1191) 1:A:38:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 15 0.63 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:145:MET:H 3 0.62 (1,1042) 1:A:14:IEU:HB2 1:A:144:GLU:HB2 2 0.58 (1,1202) 1:A:146:GLN:H 1:A:147:LEU:HB2 2 0.58 (1,1191) 1:A:33:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 14 0.56 (1,667) 1:A:39:TYR:HB2 1:A:75:PHE:HE1 17 0.55 (1,1091) 1:A:36:GLU:HA 1:A:39:TYR:HB2 10 0.55 (1,1007) 1:A:2:ASP:HB2 1:A:3:PHE:HB2 2 0.55 (1,1007) 1:A:4:6:HB1 1:A:76:PRO:HB2 20 0.54 (1,655) 1:A:35:PHE:HB1 1:A:73:PHE:HB1 4 0.53 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET	(1,1132)	1:A:60:ARG:HA	1:A:133:GLU:HG2	5	0.76
(1,630) 1:A:109:ILE:HG12 1:A:113:TYR:HD1 2 0.63 (1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 15 0.63 (1,1091) 1:A:36:GLU:HA 1:A:39:TYR:HB2 5 0.63 (1,1091) 1:A:36:GLU:HA 1:A:39:TYR:HB2 5 0.63 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:145:EW:HB2 5 0.63 (1,1042) 1:A:14:GLU:HB2 1:A:145:EW:HB2 1:A:145:EW:HB2 0.62 (1,1202) 1:A:14:GCN:H 1:A:147:LEU:HB2 2 0.58 (1,1191) 1:A:38:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 14 0.56 (1,667) 1:A:39:TYR:HB2 1:A:75:PHE:HE1 17 0.55 (1,1091) 1:A:36:GLU:HA 1:A:39:TYR:HB2 10 0.55 (1,1070) 1:A:2:ASP:HB2 1:A:3:PHE:HB2 2 0.55 (1,1070) 1:A:3:5:PHE:HB1 1:A:76:PRO:HB2 20 0.54 (1,655) 1:A:35:PHE:HB1 1:A:13:2:TYR:HB1 1 0.53 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 <	(1,1132)	1:A:60:ARG:HA	1:A:133:GLU:HG2	7	0.72
(1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 15 0.63 (1,1091) 1:A:36:GLU:HA 1:A:39:TYR:HB2 5 0.63 (1,1135) 1:A:44:MET:HG2 1:A:454:MET:H 3 0.62 (1,1042) 1:A:14:LEU:HB2 1:A:94:SER:H 17 0.62 (1,1020) 1:A:146:GLN:H 1:A:141:GU:HG2 14 0.56 (1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GU:HG2 14 0.56 (1,667) 1:A:39:TYR:HB2 1:A:75:PHE:HE1 17 0.55 (1,1091) 1:A:36:GU:HA 1:A:39:TYR:HB2 10 0.55 (1,1091) 1:A:36:GU:HA 1:A:39:TYR:HB2 10 0.55 (1,1091) 1:A:36:GU:HA 1:A:39:TYR:HB2 20 0.54 (1,1050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PRO:HB2 20 0.54 (1,655) 1:A:35:PHE:HE1 1:A:73:PHE:HE1 4 0.53 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 11 0.53 (1,1135) 1:A:64:MET:HB2 1:A:154:MET:H <td>(1,1050)</td> <td>1:A:17:VAL:HB</td> <td>1:A:76:PRO:HB2</td> <td>14</td> <td>0.67</td>	(1,1050)	1:A:17:VAL:HB	1:A:76:PRO:HB2	14	0.67
(1,1091) 1:A:36:GLU:HA 1:A:39:TYR:HB2 5 0.63 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 3 0.62 (1,1042) 1:A:14:LEU:HB2 1:A:94:SER:H 17 0.62 (1,1202) 1:A:146:GLN:H 1:A:147:LEU:HB2 2 0.58 (1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 14 0.56 (1,667) 1:A:39:TYR:HB2 1:A:75:PHE:HE1 17 0.55 (1,1091) 1:A:36:GLU:HA 1:A:39:TYR:HB2 10 0.55 (1,1007) 1:A:2:ASP:HB2 1:A:3:PHE:HB2 2 0.55 (1,1050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PRO:HB2 20 0.54 (1,655) 1:A:35:PHE:HB1 1:A:73:PHE:HB1 4 0.53 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 11 0.53 (1,135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 15 0.52 (1,667) 1:A:39:TYR:HB2 1:A:154:MET:H 15 0.51 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H	(1,630)	1:A:109:ILE:HG12	1:A:113:TYR:HD1	2	0.63
(1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 3 0.62 (1,1042) 1:A:14:LEU:HB2 1:A:94:SER:H 17 0.62 (1,1202) 1:A:146:GLN:H 1:A:147:LEU:HB2 2 0.58 (1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 14 0.56 (1,667) 1:A:39:TYR:HB2 1:A:75:PHE:HE1 17 0.55 (1,1091) 1:A:36:GLU:HA 1:A:39:TYR:HB2 10 0.55 (1,1007) 1:A:2:ASP:HB2 1:A:39:TYR:HB2 2 0.55 (1,1050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PRO:HB2 20 0.54 (1,655) 1:A:35:PHE:HE1 1:A:73:PHE:HB1 4 0.53 (1,135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 11 0.53 (1,135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 15 0.52 (1,667) 1:A:39:TYR:HB2 1:A:75:PHE:HE1 7 0.52 (1,667) 1:A:39:TYR:HB2 1:A:154:MET:H 8 0.51 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H	(1,1191)	1:A:138:ASN:HB2	1:A:141:GLU:HG2	15	0.63
(1,1042) 1:A:14:LEU:HB2 1:A:94:SER:H 17 0.62 (1,1202) 1:A:146:GLN:H 1:A:147:LEU:HB2 2 0.58 (1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 14 0.56 (1,667) 1:A:39:TYR:HB2 1:A:75:PHE:HE1 17 0.55 (1,1091) 1:A:36:GLU:HA 1:A:39:TYR:HB2 10 0.55 (1,1007) 1:A:2:ASP:HB2 1:A:3:PHE:HB2 2 0.55 (1,1050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PRO:HB2 20 0.54 (1,655) 1:A:35:PHE:HE1 1:A:73:PHE:HE1 4 0.53 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 11 0.53 (1,638) 1:A:58:PHE:HB2 1:A:154:MET:H 15 0.52 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:14:GLU:HG2 5 0.51 (1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 5 0.51 (1,1191) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 8 0.51 (1,1113) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 <td>(1,1091)</td> <td>1:A:36:GLU:HA</td> <td>1:A:39:TYR:HB2</td> <td>5</td> <td>0.63</td>	(1,1091)	1:A:36:GLU:HA	1:A:39:TYR:HB2	5	0.63
(1,1042) 1:A:14:LEU:HB2 1:A:94:SER:H 17 0.62 (1,1202) 1:A:146:GLN:H 1:A:147:LEU:HB2 2 0.58 (1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 14 0.56 (1,667) 1:A:39:TYR:HB2 1:A:75:PHE:HE1 17 0.55 (1,1091) 1:A:36:GLU:HA 1:A:39:TYR:HB2 10 0.55 (1,1007) 1:A:2:ASP:HB2 1:A:3:PHE:HB2 2 0.55 (1,1050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PRO:HB2 20 0.54 (1,655) 1:A:35:PHE:HE1 1:A:73:PHE:HE1 4 0.53 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 11 0.53 (1,638) 1:A:58:PHE:HB2 1:A:132:TYR:HE1 7 0.52 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 15 0.52 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:141:GLU:HG2 5 0.51 (1,1191) 1:A:63:TYR:HB2 1:A:154:MET:H 8 0.51 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:75:PHE:HB1 <td>(1,1135)</td> <td>1:A:64:MET:HG2</td> <td>1:A:154:MET:H</td> <td>3</td> <td>0.62</td>	(1,1135)	1:A:64:MET:HG2	1:A:154:MET:H	3	0.62
(1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 14 0.56 (1,667) 1:A:39:TYR:HB2 1:A:75:PHE:HE1 17 0.55 (1,1091) 1:A:36:GLU:HA 1:A:39:TYR:HB2 10 0.55 (1,1007) 1:A:2:ASP:HB2 1:A:3:PHE:HB2 2 0.55 (1,1050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PRO:HB2 20 0.54 (1,655) 1:A:35:PHE:HE1 1:A:73:PHE:HE1 4 0.53 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 11 0.53 (1,638) 1:A:58:PHE:HB2 1:A:154:MET:H 1 0.52 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 15 0.52 (1,667) 1:A:39:TYR:HB2 1:A:75:PHE:HE1 5 0.51 (1,1191) 1:A:64:MET:HG2 1:A:141:GLU:HG2 5 0.51 (1,1133) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 8 0.51 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 15 0.51 (1,1113) 1:A:61:TYR:HA 1:A:75:PHE:HE1		1:A:14:LEU:HB2	1:A:94:SER:H	17	0.62
(1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 14 0.56 (1,667) 1:A:39:TYR:HB2 1:A:75:PHE:HE1 17 0.55 (1,1091) 1:A:36:GLU:HA 1:A:39:TYR:HB2 10 0.55 (1,1007) 1:A:2:ASP:HB2 1:A:3:PHE:HB2 2 0.55 (1,1050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PRO:HB2 20 0.54 (1,655) 1:A:35:PHE:HE1 1:A:73:PHE:HE1 4 0.53 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 11 0.53 (1,638) 1:A:58:PHE:HB2 1:A:154:MET:H 1 0.52 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 15 0.52 (1,667) 1:A:39:TYR:HB2 1:A:75:PHE:HE1 5 0.51 (1,1191) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 8 0.51 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 5 0.51 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:51:LYS:HD2 8 0.51 (1,1113) 1:A:61:TYR:HA 1:A:75:PHE:HE1	(1,1202)	1:A:146:GLN:H	1:A:147:LEU:HB2	2	0.58
(1,1091) 1:A:36:GLU:HA 1:A:39:TYR:HB2 10 0.55 (1,1007) 1:A:2:ASP:HB2 1:A:3:PHE:HB2 2 0.55 (1,050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PRO:HB2 20 0.54 (1,655) 1:A:35:PHE:HE1 1:A:73:PHE:HE1 4 0.53 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 11 0.53 (1,638) 1:A:58:PHE:HB2 1:A:132:TYR:HE1 7 0.52 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 15 0.52 (1,1667) 1:A:39:TYR:HB2 1:A:75:PHE:HE1 5 0.51 (1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:154:MET:H 8 0.51 (1,1193) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 8 0.51 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 8 0.51 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 15 0.51 (1,1113) 1:A:651:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 4 0.5 (1,1113) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H		1:A:138:ASN:HB2	1:A:141:GLU:HG2	14	0.56
(1,1007) 1:A:2:ASP:HB2 1:A:3:PHE:HB2 2 0.55 (1,1050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PRO:HB2 20 0.54 (1,655) 1:A:35:PHE:HE1 1:A:73:PHE:HE1 4 0.53 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 11 0.53 (1,638) 1:A:58:PHE:HB2 1:A:154:MET:H 1 0.52 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 15 0.52 (1,667) 1:A:39:TYR:HB2 1:A:75:PHE:HE1 5 0.51 (1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 5 0.51 (1,1193) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 8 0.51 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 15 0.51 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 8 0.51 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 11 0.5 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:75:PHE:HE1 15 0.48 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H	(1,667)	1:A:39:TYR:HB2	1:A:75:PHE:HE1	17	0.55
(1,1050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PRO:HB2 20 0.54 (1,655) 1:A:35:PHE:HE1 1:A:73:PHE:HE1 4 0.53 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 11 0.53 (1,638) 1:A:58:PHE:HB2 1:A:132:TYR:HE1 7 0.52 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 15 0.52 (1,667) 1:A:39:TYR:HB2 1:A:75:PHE:HE1 5 0.51 (1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 5 0.51 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 8 0.51 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 15 0.51 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 8 0.51 (1,1113) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 11 0.5 (1,1113) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 7 0.48 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 7 0.48 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H	(1,1091)	1:A:36:GLU:HA	1:A:39:TYR:HB2	10	0.55
(1,655) 1:A:35:PHE:HE1 1:A:73:PHE:HE1 4 0.53 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 11 0.53 (1,638) 1:A:58:PHE:HB2 1:A:132:TYR:HE1 7 0.52 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 15 0.52 (1,667) 1:A:39:TYR:HB2 1:A:75:PHE:HE1 5 0.51 (1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 5 0.51 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 8 0.51 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 15 0.51 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 8 0.51 (1,1113) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 11 0.5 (1,1113) 1:A:61:TYR:HA 1:A:51:LYS:HD2 4 0.5 (1,1113) 1:A:64:MET:HB3 1:A:75:PHE:HE1 15 0.48 (1,1113) 1:A:64:MET:HB3 1:A:75:PHE:HE1 15 0.48 (1,1135) 1:A:64:MET:HB3 1:A:75:PHE:HB1 <td>(1,1007)</td> <td>1:A:2:ASP:HB2</td> <td>1:A:3:PHE:HB2</td> <td>2</td> <td>0.55</td>	(1,1007)	1:A:2:ASP:HB2	1:A:3:PHE:HB2	2	0.55
(1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 11 0.53 (1,638) 1:A:58:PHE:HB2 1:A:132:TYR:HE1 7 0.52 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 15 0.52 (1,667) 1:A:39:TYR:HB2 1:A:75:PHE:HE1 5 0.51 (1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 5 0.51 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 8 0.51 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 15 0.51 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 8 0.51 (1,1113) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 11 0.5 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:75:PHE:HE1 15 0.48 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 7 0.48 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 7 0.48 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 7 0.48 (1,1133) 1:A:651:LYS:HA 1:A:70:GLU:HG2	(1,1050)	1:A:17:VAL:HB	1:A:76:PRO:HB2	20	0.54
(1,638) 1:A:58:PHE:HB2 1:A:132:TYR:HE1 7 0.52 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 15 0.52 (1,667) 1:A:39:TYR:HB2 1:A:75:PHE:HE1 5 0.51 (1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 5 0.51 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 8 0.51 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 15 0.51 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 8 0.51 (1,1113) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 11 0.5 (1,1113) 1:A:61:TYR:HA 1:A:75:PHE:HE1 15 0.48 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 7 0.48 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 7 0.48 (1,1133) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 7 0.48 (1,1133) 1:A:64:MET:HG2 1:A:159:LEU:H 1 0.42 (1,1133) 1:A:651:LYS:HA 1:A:70:GLU:HG2	(1,655)	1:A:35:PHE:HE1	1:A:73:PHE:HE1	4	0.53
(1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 15 0.52 (1,667) 1:A:39:TYR:HB2 1:A:75:PHE:HE1 5 0.51 (1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 5 0.51 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 8 0.51 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 15 0.51 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 8 0.51 (1,1113) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 11 0.5 (1,1113) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 11 0.5 (1,1113) 1:A:39:TYR:HB3 1:A:75:PHE:HE1 15 0.48 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 7 0.48 (1,1113) 1:A:61:TYR:HA 1:A:51:LYS:HD2 5 0.48 (1,1113) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 4 0.44 (1,1206) 1:A:154:MET:HB2 1:A:159:LEU:H 13 0.42 (1,1007) 1:A:2:ASP:HB2 1:A:3:PHE:HB2	(1,1135)	1:A:64:MET:HG2	1:A:154:MET:H	11	0.53
(1,667) 1:A:39:TYR:HB2 1:A:75:PHE:HE1 5 0.51 (1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 5 0.51 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 8 0.51 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 15 0.51 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 8 0.51 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:70:GLU:HG2 11 0.5 (1,1113) 1:A:61:TYR:HA 1:A:51:LYS:HD2 4 0.5 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 4 0.5 (1,668) 1:A:39:TYR:HB3 1:A:75:PHE:HE1 15 0.48 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 7 0.48 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 4 0.44 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 4 0.44 (1,1153) 1:A:61:TYR:HB2 1:A:159:LEU:H 13 0.42 (1,1153) 1:A:96:LYS:HB2 1:A:97:ALA:H	(1,638)	1:A:58:PHE:HB2	1:A:132:TYR:HE1	7	0.52
(1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 5 0.51 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 8 0.51 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 15 0.51 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 8 0.51 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 19 0.51 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 11 0.5 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 4 0.5 (1,668) 1:A:39:TYR:HB3 1:A:75:PHE:HE1 15 0.48 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 7 0.48 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:51:LYS:HD2 5 0.48 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 4 0.44 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:159:LEU:H 13 0.42 (1,1153) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:179:ALA:H 15 0.42 (1,1007) 1:A:2:ASP:HB2 1:A:3:PHE:HB2	(1,1135)	1:A:64:MET:HG2	1:A:154:MET:H	15	0.52
(1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 8 0.51 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 15 0.51 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 8 0.51 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 19 0.51 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 11 0.5 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 4 0.5 (1,668) 1:A:39:TYR:HB3 1:A:75:PHE:HE1 15 0.48 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 7 0.48 (1,1113) 1:A:61:TYR:HA 1:A:51:LYS:HD2 5 0.48 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 4 0.44 (1,1206) 1:A:154:MET:HB2 1:A:159:LEU:H 13 0.42 (1,1153) 1:A:96:LYS:HB2 1:A:97:ALA:H 15 0.42 (1,007) 1:A:2:ASP:HB2 1:A:3:PHE:HB2 10 0.42 (1,642) 1:A:109:ILE:HG13 1:A:170:GLU:H	(1,667)	1:A:39:TYR:HB2	1:A:75:PHE:HE1	5	0.51
(1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 15 0.51 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 8 0.51 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 19 0.51 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 11 0.5 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 4 0.5 (1,668) 1:A:39:TYR:HB3 1:A:75:PHE:HE1 15 0.48 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 7 0.48 (1,1113) 1:A:61:TYR:HA 1:A:51:LYS:HD2 5 0.48 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 4 0.44 (1,1206) 1:A:154:MET:HB2 1:A:159:LEU:H 13 0.42 (1,1153) 1:A:96:LYS:HB2 1:A:97:ALA:H 15 0.42 (1,007) 1:A:2:ASP:HB2 1:A:3:PHE:HB2 10 0.42 (1,642) 1:A:109:ILE:HG13 1:A:113:TYR:HD1 7 0.41 (1,1136) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H	(1,1191)	1:A:138:ASN:HB2	1:A:141:GLU:HG2	5	0.51
(1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 8 0.51 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 19 0.51 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 11 0.5 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 4 0.5 (1,668) 1:A:39:TYR:HB3 1:A:75:PHE:HE1 15 0.48 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 7 0.48 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 5 0.48 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 4 0.44 (1,1206) 1:A:154:MET:HB2 1:A:159:LEU:H 13 0.42 (1,1153) 1:A:96:LYS:HB2 1:A:97:ALA:H 15 0.42 (1,1007) 1:A:2:ASP:HB2 1:A:3:PHE:HB2 10 0.42 (1,642) 1:A:109:ILE:HG13 1:A:70:GLU:H 7 0.41 (1,1136) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 17 0.41	(1,1135)	1:A:64:MET:HG2	1:A:154:MET:H	8	0.51
(1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 19 0.51 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 11 0.5 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 4 0.5 (1,668) 1:A:39:TYR:HB3 1:A:75:PHE:HE1 15 0.48 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 7 0.48 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 5 0.48 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 4 0.44 (1,1206) 1:A:154:MET:HB2 1:A:159:LEU:H 13 0.42 (1,1153) 1:A:96:LYS:HB2 1:A:97:ALA:H 15 0.42 (1,1007) 1:A:2:ASP:HB2 1:A:3:PHE:HB2 10 0.42 (1,642) 1:A:109:ILE:HG13 1:A:113:TYR:HD1 7 0.41 (1,1136) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 17 0.41	(1,1133)	1:A:61:TYR:HA	1:A:70:GLU:HG2	15	0.51
(1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 11 0.5 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 4 0.5 (1,668) 1:A:39:TYR:HB3 1:A:75:PHE:HE1 15 0.48 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 7 0.48 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 5 0.48 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 4 0.44 (1,1206) 1:A:154:MET:HB2 1:A:159:LEU:H 13 0.42 (1,1153) 1:A:96:LYS:HB2 1:A:97:ALA:H 15 0.42 (1,1007) 1:A:2:ASP:HB2 1:A:3:PHE:HB2 10 0.42 (1,642) 1:A:109:ILE:HG13 1:A:113:TYR:HD1 7 0.41 (1,1136) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 17 0.41	(1,1113)	1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HD2	8	0.51
(1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 11 0.5 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 4 0.5 (1,668) 1:A:39:TYR:HB3 1:A:75:PHE:HE1 15 0.48 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 7 0.48 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 5 0.48 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 4 0.44 (1,1206) 1:A:154:MET:HB2 1:A:159:LEU:H 13 0.42 (1,1153) 1:A:96:LYS:HB2 1:A:97:ALA:H 15 0.42 (1,1007) 1:A:2:ASP:HB2 1:A:3:PHE:HB2 10 0.42 (1,642) 1:A:109:ILE:HG13 1:A:113:TYR:HD1 7 0.41 (1,1136) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 17 0.41	(1,1113)	1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HD2	19	0.51
(1,668) 1:A:39:TYR:HB3 1:A:75:PHE:HE1 15 0.48 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 7 0.48 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 5 0.48 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 4 0.44 (1,1206) 1:A:154:MET:HB2 1:A:159:LEU:H 13 0.42 (1,1153) 1:A:96:LYS:HB2 1:A:97:ALA:H 15 0.42 (1,1007) 1:A:2:ASP:HB2 1:A:3:PHE:HB2 10 0.42 (1,642) 1:A:109:ILE:HG13 1:A:113:TYR:HD1 7 0.41 (1,1136) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 17 0.41		1:A:61:TYR:HA	1:A:70:GLU:HG2	11	0.5
(1,668) 1:A:39:TYR:HB3 1:A:75:PHE:HE1 15 0.48 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 7 0.48 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 5 0.48 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 4 0.44 (1,1206) 1:A:154:MET:HB2 1:A:159:LEU:H 13 0.42 (1,1153) 1:A:96:LYS:HB2 1:A:97:ALA:H 15 0.42 (1,1007) 1:A:2:ASP:HB2 1:A:3:PHE:HB2 10 0.42 (1,642) 1:A:109:ILE:HG13 1:A:113:TYR:HD1 7 0.41 (1,1136) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 17 0.41		1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HD2	4	0.5
(1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 5 0.48 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 4 0.44 (1,1206) 1:A:154:MET:HB2 1:A:159:LEU:H 13 0.42 (1,1153) 1:A:96:LYS:HB2 1:A:97:ALA:H 15 0.42 (1,1007) 1:A:2:ASP:HB2 1:A:3:PHE:HB2 10 0.42 (1,642) 1:A:109:ILE:HG13 1:A:113:TYR:HD1 7 0.41 (1,1136) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 17 0.41		1:A:39:TYR:HB3	1:A:75:PHE:HE1	15	0.48
(1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 5 0.48 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 4 0.44 (1,1206) 1:A:154:MET:HB2 1:A:159:LEU:H 13 0.42 (1,1153) 1:A:96:LYS:HB2 1:A:97:ALA:H 15 0.42 (1,1007) 1:A:2:ASP:HB2 1:A:3:PHE:HB2 10 0.42 (1,642) 1:A:109:ILE:HG13 1:A:113:TYR:HD1 7 0.41 (1,1136) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 17 0.41	(1,1135)	1:A:64:MET:HG2	1:A:154:MET:H	7	0.48
(1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 4 0.44 (1,1206) 1:A:154:MET:HB2 1:A:159:LEU:H 13 0.42 (1,1153) 1:A:96:LYS:HB2 1:A:97:ALA:H 15 0.42 (1,1007) 1:A:2:ASP:HB2 1:A:3:PHE:HB2 10 0.42 (1,642) 1:A:109:ILE:HG13 1:A:113:TYR:HD1 7 0.41 (1,1136) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 17 0.41		1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HD2	5	0.48
(1,1206) 1:A:154:MET:HB2 1:A:159:LEU:H 13 0.42 (1,1153) 1:A:96:LYS:HB2 1:A:97:ALA:H 15 0.42 (1,1007) 1:A:2:ASP:HB2 1:A:3:PHE:HB2 10 0.42 (1,642) 1:A:109:ILE:HG13 1:A:113:TYR:HD1 7 0.41 (1,1136) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 17 0.41	(1,1133)	1:A:61:TYR:HA	1:A:70:GLU:HG2	4	0.44
(1,1153) 1:A:96:LYS:HB2 1:A:97:ALA:H 15 0.42 (1,1007) 1:A:2:ASP:HB2 1:A:3:PHE:HB2 10 0.42 (1,642) 1:A:109:ILE:HG13 1:A:113:TYR:HD1 7 0.41 (1,1136) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 17 0.41		1:A:154:MET:HB2	1:A:159:LEU:H	13	0.42
(1,1007) 1:A:2:ASP:HB2 1:A:3:PHE:HB2 10 0.42 (1,642) 1:A:109:ILE:HG13 1:A:113:TYR:HD1 7 0.41 (1,1136) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 17 0.41	· · /	1:A:96:LYS:HB2	1:A:97:ALA:H	15	0.42
(1,642) 1:A:109:ILE:HG13 1:A:113:TYR:HD1 7 0.41 (1,1136) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 17 0.41			1:A:3:PHE:HB2	10	0.42
(1,1136) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 17 0.41	· · /	1:A:109:ILE:HG13	1:A:113:TYR:HD1	7	0.41
	(' /	1:A:69:PHE:HB2	1:A:70:GLU:H	17	0.41
(1,1100) 1.71.04.111.1102 1.71.104.111.11 0 0.41	(1,1135)	1:A:64:MET:HG2	1:A:154:MET:H	5	0.41



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1081)	1:A:31:LEU:HA	1:A:34:LEU:HB2	10	0.41
(1,1209)	1:A:156:HIS:H	1:A:156:HIS:HB2	3	0.4
(1,1185)	1:A:125:PHE:HB3	1:A:155:LEU:HB2	18	0.4
(1,1185)	1:A:125:PHE:HB3	1:A:155:LEU:HB2	19	0.4
(1,1135)	1:A:64:MET:HG2	1:A:154:MET:H	13	0.4
(1,1019)	1:A:9:CYS:HB2	1:A:100:SER:HA	6	0.4
(1,1157)	1:A:100:SER:HB2	1:A:116:LEU:HA	17	0.39
(1,1115)	1:A:51:LYS:HB2	1:A:52:SER:H	9	0.39
(1,1209)	1:A:156:HIS:H	1:A:156:HIS:HB2	5	0.38
(1,1206)	1:A:154:MET:HB2	1:A:159:LEU:H	18	0.38
(1,1153)	1:A:96:LYS:HB2	1:A:97:ALA:H	17	0.38
(1,1136)	1:A:69:PHE:HB2	1:A:70:GLU:H	2	0.38
(1,1132)	1:A:60:ARG:HA	1:A:133:GLU:HG2	11	0.38
(1,1007)	1:A:2:ASP:HB2	1:A:3:PHE:HB2	6	0.38
(1,1135)	1:A:64:MET:HG2	1:A:154:MET:H	19	0.37
(1,1115)	1:A:51:LYS:HB2	1:A:52:SER:H	10	0.37
(1,1091)	1:A:36:GLU:HA	1:A:39:TYR:HB2	13	0.37
(1,1159)	1:A:101:LEU:HB2	1:A:136:LEU:HD11	17	0.36
(1,1159)	1:A:101:LEU:HB2	1:A:136:LEU:HD12	17	0.36
(1,1159)	1:A:101:LEU:HB2	1:A:136:LEU:HD13	17	0.36
(1,1040)	1:A:13:GLU:HG2	1:A:96:LYS:HG2	15	0.36
(1,1019)	1:A:9:CYS:HB2	1:A:100:SER:HA	1	0.36
(1,1208)	1:A:155:LEU:HB2	1:A:156:HIS:H	3	0.35
(1,1136)	1:A:69:PHE:HB2	1:A:70:GLU:H	16	0.34
(1,1182)	1:A:122:ASP:H	1:A:122:ASP:HB2	7	0.33
(1,1179)	1:A:118:LYS:HG2	1:A:121:ASP:HB2	9	0.33
(1,1151)	1:A:94:SER:HB2	1:A:95:GLY:H	4	0.33
(1,1115)	1:A:51:LYS:HB2	1:A:52:SER:H	7	0.33
(1,1115)	1:A:51:LYS:HB2	1:A:52:SER:H	12	0.33
(1,1115)	1:A:51:LYS:HB2	1:A:52:SER:H	15	0.33
(1,1115)	1:A:51:LYS:HB2	1:A:52:SER:H	17	0.33
(1,1177)	1:A:118:LYS:HA	1:A:121:ASP:HB2	3	0.32
(1,1124)	1:A:53:PRO:HB2	1:A:75:PHE:HB2	14	0.32
(1,633)	1:A:102:TYR:HA	1:A:149:THR:HB	15	0.31
(1,569)	1:A:96:LYS:HA	1:A:96:LYS:HE2	7	0.31
(1,410)	1:A:58:PHE:HE1	1:A:75:PHE:H	15	0.31
(1,1177)	1:A:118:LYS:HA	1:A:121:ASP:HB2	18	0.31
(1,1095)	1:A:45:LEU:HB2	1:A:84:SER:HB2	13	0.31
(1,1175)	1:A:116:LEU:HA	1:A:119:TRP:HB2	8	0.3
(1,1151)	1:A:94:SER:HB2	1:A:95:GLY:H	1	0.3
(1,1109)	1:A:49:GLN:HE21	1:A:82:GLU:HB2	11	0.3
(1,199)	1:A:140:ALA:H	1:A:141:GLU:H	9	0.29



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1206)	1:A:154:MET:HB2	1:A:159:LEU:H	2	0.29
(1,1136)	1:A:69:PHE:HB2	1:A:70:GLU:H	4	0.29
(1,1136)	1:A:69:PHE:HB2	1:A:70:GLU:H	5	0.29
(1,1136)	1:A:69:PHE:HB2	1:A:70:GLU:H	11	0.29
(1,1136)	1:A:69:PHE:HB2	1:A:70:GLU:H	13	0.29
(1,1128)	1:A:53:PRO:HD2	1:A:54:SER:H	8	0.29
(1,1114)	1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HE2	20	0.29
(1,641)	1:A:7:PHE:HE1	1:A:102:TYR:HE1	2	0.28
(1,1208)	1:A:155:LEU:HB2	1:A:156:HIS:H	1	0.28
(1,1177)	1:A:118:LYS:HA	1:A:121:ASP:HB2	2	0.28
(1,1151)	1:A:94:SER:HB2	1:A:95:GLY:H	20	0.28
(1,1136)	1:A:69:PHE:HB2	1:A:70:GLU:H	12	0.28
(1,1136)	1:A:69:PHE:HB2	1:A:70:GLU:H	15	0.28
(1,1128)	1:A:53:PRO:HD2	1:A:54:SER:H	18	0.28
(1,1114)	1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HE2	16	0.28
(1,467)	1:A:11:LEU:H	1:A:11:LEU:HB2	19	0.27
(1,1136)	1:A:69:PHE:HB2	1:A:70:GLU:H	18	0.27
(1,1135)	1:A:64:MET:HG2	1:A:154:MET:H	12	0.27
(1,1095)	1:A:45:LEU:HB2	1:A:84:SER:HB2	15	0.27
(1,1042)	1:A:14:LEU:HB2	1:A:94:SER:H	13	0.27
(1,90)	1:A:28:MET:H	1:A:29:SER:H	11	0.26
(1,638)	1:A:58:PHE:HB2	1:A:132:TYR:HE1	12	0.26
(1,143)	1:A:89:THR:HB	1:A:90:GLY:H	16	0.26
(1,1173)	1:A:114:ASP:HB2	1:A:115:ALA:H	10	0.26
(1,1168)	1:A:110:GLU:H	1:A:110:GLU:HB2	4	0.26
(1,1042)	1:A:14:LEU:HB2	1:A:94:SER:H	4	0.26
(1,1023)	1:A:10:GLU:HB2	1:A:11:LEU:H	6	0.26
(1,1023)	1:A:10:GLU:HB2	1:A:11:LEU:H	11	0.26
(1,660)	1:A:58:PHE:HB3	1:A:132:TYR:HE1	13	0.25
(1,143)	1:A:89:THR:HB	1:A:90:GLY:H	15	0.25
(1,1208)	1:A:155:LEU:HB2	1:A:156:HIS:H	4	0.25
(1,1208)	1:A:155:LEU:HB2	1:A:156:HIS:H	14	0.25
(1,1153)	1:A:96:LYS:HB2	1:A:97:ALA:H	16	0.25
(1,1132)	1:A:60:ARG:HA	1:A:133:GLU:HG2	8	0.25
(1,1128)	1:A:53:PRO:HD2	1:A:54:SER:H	11	0.25
(1,1128)	1:A:53:PRO:HD2	1:A:54:SER:H	19	0.25
(1,1023)	1:A:10:GLU:HB2	1:A:11:LEU:H	19	0.25
(1,177)	1:A:120:VAL:HB	1:A:121:ASP:H	1	0.24
(1,1151)	1:A:94:SER:HB2	1:A:95:GLY:H	5	0.24
(1,1147)	1:A:83:GLY:HA2	1:A:89:THR:H	8	0.24
(1,1136)	1:A:69:PHE:HB2	1:A:70:GLU:H	6	0.24
(1,1136)	1:A:69:PHE:HB2	1:A:70:GLU:H	8	0.24



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

(1,1136) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 19 0.24 (1,1128) 1:A:53:PRO:HD2 1:A:54:SER:H 17 0.24 (1,1114) 1:A:51:LYS:HA 1:A:54:SER:H 17 0.24 (1,1091) 1:A:36:GLU:HA 1:A:39:TYR:HB2 16 0.24 (1,1023) 1:A:10:GLU:HB2 1:A:11:LEU:H 15 0.24 (1,900) 1:A:28:MET:H 1:A:29:SER:H 2 0.23 (1,387) 1:A:144:PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 15 0.23 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 13 0.23 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 14 0.23 (1,1151) 1:A:94:SER:HB2 1:A:89:GLY:H 19 0.23 (1,1143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 19 0.23 (1,1141) 1:A:51:LYS:H 1:A:51:LYS:HB2 18 0.23 (1,1143) 1:A:4:25:PHE:H 1:A:51:LYS:HB2 18 0.23 (1,1141) 1:A:51:LYS:HB 1:A:51:LYS:HB2 18<	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1114) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HE2 1 0.24 (1,1091) 1:A:36:GLU:HA 1:A:39:TYR:HB2 16 0.24 (1,1023) 1:A:10:GLU:HB2 1:A:11:LEU:H 15 0.24 (1,900) 1:A:28:MET:H 1:A:29:SER:H 2 0.23 (1,387) 1:A:144:PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 15 0.23 (1,387) 1:A:144:PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 15 0.23 (1,387) 1:A:144:PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 15 0.23 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 13 0.23 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 14 0.23 (1,1143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 14 0.23 (1,1151) 1:A:94:SER:HB2 1:A:95:GLY:H 19 0.23 (1,1111) 1:A:51:LYS:H 1:A:125:PHE:HB3 13 0.22 (1,1143) 1:A:89:THR:HB 1:A:125:PHE:HB3 13 0.22 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:125:PHE:HB3 13 0.22 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:125:PHE:HB3 13 0.22 (1,128) 1:A:155:LEU:HB2 1:A:156:HIS:H 5 0.22 (1,1128) 1:A:155:LEU:HB2 1:A:156:HIS:H 5 0.22 (1,1128) 1:A:155:LEU:HB2 1:A:156:HIS:H 5 0.22 (1,1128) 1:A:155:LEU:HB2 1:A:155:LEU:HB 5 0.22 (1,1151) 1:A:94:SER:HB2 1:A:155:LEU:HB 10.22 (1,1151) 1:A:94:SER:HB2 1:A:155:LYS:HB 10.22 (1,1152) 1:A:153:PRO:HD2 1:A:54:SER:H 20 0.22 (1,1114) 1:A:51:LYS:HB 1:A:12:LYS:HB 10.22 (1,1114) 1:A:51:LYS:HB 1:A:51:LYS:HB 2 1:A:15:AB:H 10.22 (1,1114) 1:A:51:LYS:HB 1:A:12:LYS:HB 2 1:A:15:LYS:HB 2 0.22 (1,1114) 1:A:51:LYS:HB 1:A:12:LYS:HB 2 1:A:15:AB:H 10.22 (1,1114) 1:A:51:LYS:HB 1:A:12:LYS:HB 2 1:A:15:AB:HB 2 0.22 (1,1114) 1:A:51:LYS:HB 1:A:111:LYS:HB 2 0.21 (1,1107) 1:A:12:LYS:HB 1:A:111:LYS:HB 2 0.21 (1,1107) 1:A:12:LYS:HB 1:A:111:LYB:HB 2 0.21 (1,1108) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:HB 2 3 0.21 (1,1108) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:HB2 3 0.21 (1,1108) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:HB2 3 0.21 (1,1108) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:HB2 3 0.21 (1,1018) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:HB2 3 0.21 (1,1019) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:HB2 3 0.21 (1,1019) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:HB2 3 0.21 (1,1019) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:HB2 8 0.2 (1,1111) 1:A:51:LYS:H 1:A:51:LYS:HB2 1 0.2 (1,1111) 1:A:51:LYS:H 1:A:51:LYS:HB2 1 0.2 (1,1111) 1:A:51:LYS:H 1:A:110:GLU:H 12 0.21 (1,1018) 1:A	(1,1136)	1:A:69:PHE:HB2	1:A:70:GLU:H	19	0.24
(1,109) 1:A:36:GLU:HA 1:A:39:TYR:HB2 16 0.24 (1,1023) 1:A:10:GLU:HB2 1:A:11:LEU:H 15 0.24 (1,900) 1:A:28:MET:H 1:A:29:SER:H 2 0.23 (1,900) 1:A:28:MET:H 1:A:29:SER:H 12 0.23 (1,387) 1:A:144*PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 15 0.23 (1,143) 1:A:39:TYR:HB 1:A:29:SGLY:H 13 0.23 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 13 0.23 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 14 0.23 (1,1151) 1:A:94:SER:HB2 1:A:95:GLY:H 6 0.23 (1,1143) 1:A:82:GLU:HB2 1:A:85:GLY:H 19 0.23 (1,111) 1:A:51:IYS:H 1:A:51:IYS:HB2 1:A:95:GLY:H 6 0.23 (1,111) 1:A:51:IYS:H 1:A:51:IYS:HB2 1:A:95:GLY:H 19 0.23 (1,111) 1:A:51:IYS:H 1:A:51:IYS:HB3 13 0.22 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 4 0.22 (1,1208) 1:A:155:LEU:HB2 1:A:156:HIS:H 5 0.22 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:156:HIS:H 5 0.22 (1,1173) 1:A:14:ASP:HB2 1:A:94:SER:H 6 0.22 (1,1151) 1:A:93:PRO:HB2 1:A:94:SER:H 18 0.22 (1,1151) 1:A:93:PRO:HB2 1:A:94:SER:H 18 0.22 (1,1114) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HB2 1:A:94:SER:H 10 0.22 (1,1114) 1:A:51:LYS:HA 1:A:12:VAL:H 18 0.22 (1,11027) 1:A:12:UYS:HA 1:A:12:VAL:H 18 0.22 (1,1114) 1:A:51:LYS:HA 1:A:12:VAL:H 15.11:VS:HB2 15 0.22 (1,1177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:112:VAL:H 20 0.21 (1,1177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:112:VAL:HB 2 0.21 (1,1177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:110:GLU:HB2 3 0.21 (1,1168) 1:A:117:VAL:H 1:A:110:GLU:HB2 15 0.21 (1,1168) 1:A:110:GLU:H 1:A:110:GLU:H 12 0.21 (1,1019) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:100:GLU:H 12 0.21 (1,1019) 1:A:140:ALA:H 1:A:141:GLU:H 18 0.19 (1,266) 1:A	(1,1128)	1:A:53:PRO:HD2	1:A:54:SER:H	17	0.24
(1,1023)	(1,1114)	1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HE2	1	0.24
(1,90) 1:A:28:MET:H 1:A:29:SER:H 2 0.23 (1,90) 1:A:28:MET:H 1:A:29:SER:H 12 0.23 (1,387) 1:A:144:PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 15 0.23 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 13 0.23 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 14 0.23 (1,1151) 1:A:94:SER:HB2 1:A:95:GLY:H 19 0.23 (1,111) 1:A:51:LYS:HB2 1:A:83:GLY:H 19 0.23 (1,111) 1:A:51:LYS:H 1:A:51:LYS:HB2 18 0.23 (1,111) 1:A:48:PHR:HB 1:A:95:GLY:H 19 0.23 (1,111) 1:A:48:PHR:HB 1:A:90:GLY:H 4 0.22 (1,1208) 1:A:14:ASP:HB2 1:A:15:HB3 13 0.22 (1,113) 1:A:48:PHR:HB 1:A:15:HB3 13 0.22 (1,1150) 1:A:39:SER:HB2 1:A:15:HB3 13 0.22 (1,1151) 1:A:49:SER:HB2 1:A:49:SER:H 18 0.22<	(1,1091)	1:A:36:GLU:HA	1:A:39:TYR:HB2	16	0.24
(1,90) 1:A:28:MET:H 1:A:29:SER:H 12 0.23 (1,387) 1:A:144:PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 15 0.23 (1,148) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 13 0.23 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 14 0.23 (1,1151) 1:A:94:SER:HB2 1:A:95:GLY:H 14 0.23 (1,1151) 1:A:94:SER:HB2 1:A:95:GLY:H 19 0.23 (1,1143) 1:A:82:GLU:HB2 1:A:83:GLY:H 19 0.23 (1,1111) 1:A:51:LYS:H 1:A:51:LYS:HB2 18 0.23 (1,1111) 1:A:51:LYS:H 1:A:51:LYS:HB2 18 0.23 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 13 0.22 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 4 0.22 (1,1208) 1:A:155:LEU:HB2 1:A:156:HIS:H 5 0.22 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:156:HIS:H 5 0.22 (1,1151) 1:A:94:SER:HB2 1:A:95:GLY:H 11 0.22 (1,1151) 1:A:94:SER:HB2 1:A:95:GLY:H 11 0.22 (1,1152) 1:A:93:PRO:HB2 1:A:94:SER:H 20 0.22 (1,1144) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HE2 11 0.22 (1,11027) 1:A:12:LYS:HA 1:A:51:LYS:HB2 15 0.22 (1,1177) 1:A:12:LYS:H 1:A:12:LYS:HB 2 0.21 (1,177) 1:A:12:VAL:HB 1:A:112:VAL:HB 2 0.21 (1,1171) 1:A:10:GLU:H 1:A:110:GLU:HB2 3 0.21 (1,1109) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:HB 15 0.21 (1,1014) 1:A:7:PHE:H 1:A:10:GLU:HB 15 0.21 (1,1014) 1:A:7:PHE:H 1:A:10:GLU:HB 15 0.21 (1,143) 1:A:61:TYR:HA 1:A:10:GLU:HB 15 0.21 (1,144) 1:A:11:LEU:H 1:A:110:GLU:HB 15 0.21 (1,1111) 1:A:111:CH:HB 1:A:110:GLU:HB 15 0.21 (1,1111) 1:A:111:CH:HB 1:A:111:CH:HB 15 0.21 (1,1111) 1:A:111:CH:HB 11:A:111:CH:HB 15 0.21 (1,1111) 1:A:111:CH:HB 11:A:111:CH:HB 11 0.2 (1,1111) 1:A:111:CH:HB 11:A:111:CH:HB 11 0.2 (1,1111) 1:A:111:CH:HB 11:A:111:	(1,1023)	1:A:10:GLU:HB2	1:A:11:LEU:H	15	0.24
(1,387) 1:A:144:PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 15 0.23 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 13 0.23 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 14 0.23 (1,1151) 1:A:94:SER:HB2 1:A:95:GLY:H 6 0.23 (1,1114) 1:A:82:GLU:HB2 1:A:83:GLY:H 19 0.23 (1,111) 1:A:51:LYS:H 1:A:83:GLY:H 19 0.23 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB2 18 0.23 (1,266) 1:A:145:S:LYS:HB 1:A:90:GLY:H 4 0.22 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 4 0.22 (1,143) 1:A:155:LU:HB2 1:A:156:HIS:H 5 0.22 (1,1173) 1:A:14:ASP:HB2 1:A:15:ALA:H 6 0.22 (1,1151) 1:A:94:SER:HB2 1:A:15:ALA:H 6 0.22 (1,1151) 1:A:94:SER:HB2 1:A:15:ALA:H 6 0.22 (1,1152) 1:A:35:LYS:HB2 1:A:49:SER:HB2 1:A:99:GL	(1,90)	1:A:28:MET:H	1:A:29:SER:H	2	0.23
(1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 13 0.23 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 14 0.23 (1,1151) 1:A:94:SER:HB2 1:A:95:GLY:H 6 0.23 (1,1143) 1:A:82:GLU:HB2 1:A:83:GLY:H 19 0.23 (1,1111) 1:A:51:LYS:H 1:A:51:LYS:HB2 18 0.23 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 13 0.22 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 4 0.22 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 4 0.22 (1,143) 1:A:455:LEU:HB2 1:A:156:HIS:H 5 0.22 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:156:HIS:H 5 0.22 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:95:GLY:H 11 0.22 (1,1150) 1:A:93:PRO:HB2 1:A:94:SER:H 18 0.22 (1,1114) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HB2 15 0.22 (1,1114) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HB2 15 0.22 (1,1177) 1:A:12:VAL:H 1:A:112:VAL:HB 2 0.21 (1,1177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:110:GLU:HB2 3 0.21 (1,1168) 1:A:110:GLU:H 1:A:110:GLU:HB2 3 0.21 (1,1109) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:HB2 15 0.21 (1,1019) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:HB2 15 0.21 (1,1019) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:HB2 15 0.21 (1,1019) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:H 12 0.21 (1,1014) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:H 12 0.21 (1,1015) 1:A:11:LEU:H 1:A:110:GLU:H 12 0.21 (1,1016) 1:A:17:VAL:HB 1:A:10:GLU:H 12 0.21 (1,1101) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:H 12 0.21 (1,1101) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:H 12 0.21 (1,1014) 1:A:7:PHE:H 1:A:11:LEU:HB2 17 0.2 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:10:GLU:HB2 8 0.2 (1,1111) 1:A:51:LYS:H 1:A:11:EU:HB2 17 0.2 (1,143) 1:A:15:PHE:H 1:A:11:EU:HB2 17 0.2 (1,1466) 1:A:125:PHE:H 1:A:11:EU:HB3 9 0.19 (1,2666) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 9 0.19 (1,2666) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 15 0.19 (1,2666) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 15 0.19 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 8 0.19 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 8 0.19 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 8 0.19 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 8 0.19	(1,90)	1:A:28:MET:H	1:A:29:SER:H	12	0.23
(1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 14 0.23 (1,1151) 1:A:94:SER:HB2 1:A:95:GLY:H 6 0.23 (1,1143) 1:A:82:GLU:HB2 1:A:83:GLY:H 19 0.23 (1,1143) 1:A:82:CBLU:HB2 1:A:83:CLY:H 19 0.23 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:51:LYS:HB2 18 0.23 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:90:GLY:H 4 0.22 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 4 0.22 (1,143) 1:A:455:LEU:HB2 1:A:156:HIS:H 5 0.22 (1,113) 1:A:155:LEU:HB2 1:A:156:HIS:H 6 0.22 (1,1173) 1:A:141:ASP:HB2 1:A:158:GLY:H 11 0.22 (1,1150) 1:A:93:PRO:HB2 1:A:49:GEV:H 11 0.22 (1,114) 1:A:53:PRO:HD2 1:A:454:SER:H 20 0.22 (1,114) 1:A:53:PRO:HD2 1:A:454:SER:H 20 0.22 (1,114) 1:A:12:LYS:HA 1:A:12:LYS:HB2 15 </td <td>(1,387)</td> <td>1:A:144:PRO:HD3</td> <td>1:A:145:ASP:H</td> <td>15</td> <td>0.23</td>	(1,387)	1:A:144:PRO:HD3	1:A:145:ASP:H	15	0.23
(1,1151) 1:A:94:SER:HB2 1:A:95:GLY:H 6 0.23 (1,1143) 1:A:82:GLU:HB2 1:A:83:GLY:H 19 0.23 (1,111) 1:A:51:LYS:H 1:A:83:GLY:H 19 0.23 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:155:LYS:HB2 18 0.23 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:155:LYS:HB3 13 0.22 (1,143) 1:A:389:THR:HB 1:A:90:GLY:H 4 0.22 (1,1208) 1:A:155:LU:HB2 1:A:156:HIS:H 5 0.22 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:155:ALA:H 6 0.22 (1,1151) 1:A:94:SER:HB2 1:A:95:GLY:H 11 0.22 (1,1150) 1:A:94:SER:HB2 1:A:95:GLY:H 11 0.22 (1,1150) 1:A:93:PRO:HB2 1:A:94:SER:H 18 0.22 (1,1150) 1:A:25:PRO:HB2 1:A:34:SER:H 20 0.22 (1,1141) 1:A:35:PRO:HB2 1:A:34:SER:H 20 0.22 (1,1144) 1:A:12:LYS:H 1:A:12:LYS:HB2 1	(1,143)	1:A:89:THR:HB	1:A:90:GLY:H	13	0.23
(1,1143) 1:A:82:GLU:HB2 1:A:83:GLY:H 19 0.23 (1,1111) 1:A:51:LYS:H 1:A:51:LYS:HB2 18 0.23 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 13 0.22 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 4 0.22 (1,1208) 1:A:155:LEU:HB2 1:A:156:HIS:H 5 0.22 (1,1173) 1:A:14:ASP:HB2 1:A:155:ALA:H 6 0.22 (1,1151) 1:A:94:SER:HB2 1:A:94:SER:H 10 0.22 (1,1150) 1:A:93:PRO:HB2 1:A:94:SER:H 18 0.22 (1,1150) 1:A:93:PRO:HB2 1:A:94:SER:H 18 0.22 (1,1150) 1:A:94:SER:HB2 1:A:94:SER:H 18 0.22 (1,1150) 1:A:35:PRO:HB2 1:A:94:SER:H 18 0.22 (1,1141) 1:A:53:PRO:HB2 1:A:94:SER:H 20 0.22 (1,1141) 1:A:12:LYS:HA 1:A:12:LYS:HB2 15 0.22 (1,277) 1:A:12:LYS:H 1:A:12:LYS:HB2 <td< td=""><td>(1,143)</td><td>1:A:89:THR:HB</td><td>1:A:90:GLY:H</td><td>14</td><td>0.23</td></td<>	(1,143)	1:A:89:THR:HB	1:A:90:GLY:H	14	0.23
(1,1111) 1:A:51:LYS:H 1:A:51:LYS:HB2 18 0.23 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 13 0.22 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 4 0.22 (1,1208) 1:A:155:LEU:HB2 1:A:156:HIS:H 5 0.22 (1,1173) 1:A:14:ASP:HB2 1:A:15:ALA:H 6 0.22 (1,1151) 1:A:94:SER:HB2 1:A:95:GLY:H 11 0.22 (1,1150) 1:A:93:PRO:HB2 1:A:94:SER:H 18 0.22 (1,1128) 1:A:53:PRO:HD2 1:A:54:SER:H 20 0.22 (1,114) 1:A:55:LYS:HA 1:A:55:LYS:HB2 11 0.22 (1,1027) 1:A:12:LYS:HA 1:A:12:LYS:HB2 15 0.22 (1,474) 1:A:110:GLU:H 1:A:112:VAL:HB 2 0.21 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:110:GLU:HB2 3 0.21 (1,1168) 1:A:17:VAL:HB 1:A:70:GLU:HG2 18 0.21 (1,1019) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GEU:HG2 <	(1,1151)	1:A:94:SER:HB2	1:A:95:GLY:H	6	0.23
(1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 13 0.22 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 4 0.22 (1,1208) 1:A:155:LEU:HB2 1:A:156:HIS:H 5 0.22 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:15:ALA:H 6 0.22 (1,1151) 1:A:93:PRO:HB2 1:A:95:GLY:H 11 0.22 (1,1150) 1:A:93:PRO:HB2 1:A:94:SER:H 18 0.22 (1,1150) 1:A:93:PRO:HB2 1:A:94:SER:H 18 0.22 (1,1150) 1:A:35:LYS:HA 1:A:54:SER:H 20 0.22 (1,1128) 1:A:53:PRO:HD2 1:A:54:SER:H 20 0.22 (1,1141) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HE2 11 0.22 (1,1027) 1:A:12:LYS:HA 1:A:12:LYS:HB2 15 0.22 (1,407) 1:A:110:GLU:H 1:A:110:GLU:HBB 2 0.21 (1,177) 1:A:12:D:VAL:HB 1:A:10:GLU:HB2 3 0.21 (1,1168) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PG:HB2 <	(1,1143)	1:A:82:GLU:HB2	1:A:83:GLY:H	19	0.23
(1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 4 0.22 (1,1208) 1:A:155:LEU:HB2 1:A:156:HIS:H 5 0.22 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:15:ALA:H 6 0.22 (1,1151) 1:A:94:SER:HB2 1:A:95:GLY:H 11 0.22 (1,1150) 1:A:93:PRO:HB2 1:A:94:SER:H 18 0.22 (1,1128) 1:A:53:PRO:HD2 1:A:54:SER:H 20 0.22 (1,1144) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HE2 11 0.22 (1,1027) 1:A:12:LYS:H 1:A:12:LYS:HB2 15 0.22 (1,474) 1:A:112:VAL:H 1:A:112:VAL:HB 2 0.21 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:110:GLU:HB2 3 0.21 (1,1168) 1:A:110:GLU:H 1:A:110:GLU:HB2 3 0.21 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:76:PRO:HB2 15 0.21 (1,1050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PRO:HB2 15 0.21 (1,1018) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:H <	(1,1111)	1:A:51:LYS:H	1:A:51:LYS:HB2	18	0.23
(1,1208) 1:A:155:LEU:HB2 1:A:156:HIS:H 5 0.22 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 6 0.22 (1,1151) 1:A:94:SER:HB2 1:A:95:GLY:H 11 0.22 (1,1150) 1:A:93:PRO:HB2 1:A:94:SER:H 18 0.22 (1,1128) 1:A:53:PRO:HD2 1:A:54:SER:H 20 0.22 (1,1114) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HE2 11 0.22 (1,1027) 1:A:12:LYS:HA 1:A:12:LYS:HB2 15 0.22 (1,474) 1:A:112:VAL:H 1:A:112:VAL:HB 2 0.21 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:110:GLU:HB2 3 0.21 (1,1168) 1:A:110:GLU:H 1:A:10:GLU:HG2 18 0.21 (1,1050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PRO:HB2 15 0.21 (1,1019) 1:A:90:CYS:HB2 1:A:10:GLU:H 12 0.21 (1,1014) 1:A:7:PHE:H 1:A:7:PHE:HB 15 0.21 (1,1467) 1:A:11:LEU:H 1:A:11:LEU:HB2	(1,266)	1:A:125:PHE:H	1:A:125:PHE:HB3	13	0.22
(1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 6 0.22 (1,1151) 1:A:94:SER:HB2 1:A:95:GLY:H 11 0.22 (1,1150) 1:A:93:PRO:HB2 1:A:94:SER:H 18 0.22 (1,1128) 1:A:53:PRO:HD2 1:A:54:SER:H 20 0.22 (1,1114) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HE2 11 0.22 (1,1027) 1:A:12:LYS:H 1:A:12:LYS:HB2 15 0.22 (1,474) 1:A:112:VAL:H 1:A:12:LYS:HB 2 0.21 (1,177) 1:A:12:0:VAL:HB 1:A:12:ASP:H 19 0.21 (1,1168) 1:A:110:GLU:H 1:A:110:GLU:HB2 3 0.21 (1,1133) 1:A:6:1*TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 18 0.21 (1,1050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PRO:HB2 15 0.21 (1,1019) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:H 12 0.21 (1,1014) 1:A:7:PHE:H 1:A:7:PHE:HB2 15 0.21 (1,467) 1:A:11:LEU:H 1:A:11:LEU:HB2 <t< td=""><td>(1,143)</td><td>1:A:89:THR:HB</td><td>1:A:90:GLY:H</td><td>4</td><td>0.22</td></t<>	(1,143)	1:A:89:THR:HB	1:A:90:GLY:H	4	0.22
(1,1151) 1:A:94:SER:HB2 1:A:95:GLY:H 11 0.22 (1,1150) 1:A:93:PRO:HB2 1:A:94:SER:H 18 0.22 (1,1128) 1:A:53:PRO:HD2 1:A:54:SER:H 20 0.22 (1,1114) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HE2 11 0.22 (1,1027) 1:A:12:LYS:H 1:A:12:LYS:HB2 15 0.22 (1,474) 1:A:112:VAL:H 1:A:112:VAL:HB 2 0.21 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:110:GLU:HB2 3 0.21 (1,177) 1:A:110:GLU:H 1:A:110:GLU:HB2 3 0.21 (1,1168) 1:A:110:GLU:H 1:A:10:GLU:HG2 18 0.21 (1,1050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PRO:HB2 15 0.21 (1,1019) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:H 12 0.21 (1,1014) 1:A:7:PHE:H 1:A:7:PHE:HB2 15 0.21 (1,1044) 1:A:7:PHE:H 1:A:11:LEU:HB2 17 0.2 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:10:GLU:HB2	(1,1208)	1:A:155:LEU:HB2	1:A:156:HIS:H	5	0.22
(1,1150) 1:A:93:PRO:HB2 1:A:94:SER:H 18 0.22 (1,1128) 1:A:53:PRO:HD2 1:A:54:SER:H 20 0.22 (1,1114) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HE2 11 0.22 (1,1027) 1:A:12:LYS:H 1:A:12:LYS:HB2 15 0.22 (1,474) 1:A:112:VAL:H 1:A:112:VAL:HB 2 0.21 (1,177) 1:A:12:0:VAL:HB 1:A:12:ASP:H 19 0.21 (1,177) 1:A:10:GLU:H 1:A:110:GLU:HB2 3 0.21 (1,1168) 1:A:110:GLU:H 1:A:10:GLU:HB2 3 0.21 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 18 0.21 (1,1050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PRO:HB2 15 0.21 (1,1019) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:H 12 0.21 (1,1018) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:H 12 0.21 (1,1014) 1:A:7:PHE:H 1:A:7:PHE:HB2 15 0.21 (1,467) 1:A:11:EU:H 1:A:11:EU:HB2 17 </td <td>(1,1173)</td> <td>1:A:114:ASP:HB2</td> <td>1:A:115:ALA:H</td> <td>6</td> <td>0.22</td>	(1,1173)	1:A:114:ASP:HB2	1:A:115:ALA:H	6	0.22
(1,1128) 1:A:53:PRO:HD2 1:A:54:SER:H 20 0.22 (1,1114) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HE2 11 0.22 (1,1027) 1:A:12:LYS:H 1:A:12:LYS:HB2 15 0.22 (1,474) 1:A:12:VAL:H 1:A:112:VAL:HB 2 0.21 (1,177) 1:A:12:0:VAL:HB 1:A:12:LYS:H 19 0.21 (1,1168) 1:A:110:GLU:H 1:A:110:GLU:HB2 3 0.21 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 18 0.21 (1,1050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PRO:HB2 15 0.21 (1,1019) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:100:SER:HA 17 0.21 (1,1018) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:H 12 0.21 (1,1014) 1:A:7:PHE:H 1:A:7:PHE:HB2 15 0.21 (1,467) 1:A:11:LEU:H 1:A:11:LEU:HB2 17 0.2 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLV:H 11 0.2 (1,1111) 1:A:55:LYS:H 1:A:156:HIS:HB2 3<	(1,1151)	1:A:94:SER:HB2	1:A:95:GLY:H	11	0.22
(1,1114) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HE2 11 0.22 (1,1027) 1:A:12:LYS:H 1:A:12:LYS:HB2 15 0.22 (1,474) 1:A:112:VAL:H 1:A:112:VAL:HB 2 0.21 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 19 0.21 (1,1168) 1:A:110:GLU:H 1:A:110:GLU:HB2 3 0.21 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 18 0.21 (1,1050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PRO:HB2 15 0.21 (1,1019) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:H 12 0.21 (1,1018) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:H 12 0.21 (1,1014) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:H 12 0.21 (1,1014) 1:A:7:PHE:H 1:A:7:PHE:HB2 15 0.21 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:11:LEU:HB2 17 0.2 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:110:GLU:HB2 8 0.2 (1,1111) 1:A:51:LYS:H 1:A:51:LYS:HB2 1<	(1,1150)	1:A:93:PRO:HB2	1:A:94:SER:H	18	0.22
(1,1027) 1:A:12:LYS:H 1:A:12:LYS:HB2 15 0.22 (1,474) 1:A:112:VAL:H 1:A:112:VAL:HB 2 0.21 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 19 0.21 (1,1168) 1:A:110:GLU:H 1:A:110:GLU:HB2 3 0.21 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 18 0.21 (1,1050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PRO:HB2 15 0.21 (1,1019) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:100:SER:HA 17 0.21 (1,1018) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:H 12 0.21 (1,1014) 1:A:7:PHE:H 1:A:7:PHE:HB2 15 0.21 (1,1014) 1:A:7:PHE:H 1:A:7:PHE:HB2 15 0.21 (1,467) 1:A:11:LEU:H 1:A:11:LEU:HB2 17 0.2 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:10:GLU:HB2 8 0.2 (1,111) 1:A:15:11:LEU:H 1:A:110:GLU:HB2 8 0.2 (1,1111) 1:A:15:E:HB:H 1:A:15:HB:HB:H 0.	(1,1128)	1:A:53:PRO:HD2	1:A:54:SER:H	20	0.22
(1,474) 1:A:112:VAL:H 1:A:112:VAL:HB 2 0.21 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 19 0.21 (1,1168) 1:A:110:GLU:H 1:A:110:GLU:HB2 3 0.21 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 18 0.21 (1,1050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PRO:HB2 15 0.21 (1,1019) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:H 12 0.21 (1,1018) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:H 12 0.21 (1,1014) 1:A:7:PHE:H 1:A:7:PHE:HB2 15 0.21 (1,467) 1:A:11:LEU:H 1:A:11:LEU:HB2 17 0.2 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 11 0.2 (1,1168) 1:A:110:GLU:H 1:A:110:GLU:HB2 8 0.2 (1,1111) 1:A:89:THR:HB 1:A:51:LYS:HB2 1 0.2 (1,283) 1:A:156:HIS:H 1:A:156:HIS:HB2 3 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 2 <td>(1,1114)</td> <td>1:A:51:LYS:HA</td> <td>1:A:51:LYS:HE2</td> <td>11</td> <td>0.22</td>	(1,1114)	1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HE2	11	0.22
(1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 19 0.21 (1,1168) 1:A:110:GLU:H 1:A:110:GLU:HB2 3 0.21 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 18 0.21 (1,1050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PRO:HB2 15 0.21 (1,1019) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:H 17 0.21 (1,1018) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:H 12 0.21 (1,1014) 1:A:7:PHE:H 1:A:7:PHE:HB2 15 0.21 (1,467) 1:A:11:LEU:H 1:A:11:LEU:HB2 17 0.2 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 11 0.2 (1,1168) 1:A:110:GLU:H 1:A:110:GLU:HB2 8 0.2 (1,1111) 1:A:89:THE:HB 1:A:51:LYS:HB2 1 0.2 (1,283) 1:A:156:HIS:H 1:A:156:HIS:HB2 3 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 2 0.19 (1,266) 1:A:140:ALA:H 1:A:141:GLU:H 18 <td>(1,1027)</td> <td>1:A:12:LYS:H</td> <td>1:A:12:LYS:HB2</td> <td>15</td> <td>0.22</td>	(1,1027)	1:A:12:LYS:H	1:A:12:LYS:HB2	15	0.22
(1,1168) 1:A:110:GLU:H 1:A:110:GLU:HB2 3 0.21 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 18 0.21 (1,1050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PRO:HB2 15 0.21 (1,1019) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:100:SER:HA 17 0.21 (1,1018) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:H 12 0.21 (1,1014) 1:A:7:PHE:H 1:A:7:PHE:HB2 15 0.21 (1,467) 1:A:11:LEU:H 1:A:11:LEU:HB2 17 0.2 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 11 0.2 (1,1168) 1:A:110:GLU:H 1:A:110:GLU:HB2 8 0.2 (1,1111) 1:A:51:LYS:H 1:A:51:LYS:HB2 1 0.2 (1,283) 1:A:156:HIS:H 1:A:156:HIS:HB2 3 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 2 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 15 0.19 (1,199) 1:A:140:ALA:H 1:A:141:GLU:H 18 </td <td>(1,474)</td> <td>1:A:112:VAL:H</td> <td>1:A:112:VAL:HB</td> <td>2</td> <td>0.21</td>	(1,474)	1:A:112:VAL:H	1:A:112:VAL:HB	2	0.21
(1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 18 0.21 (1,1050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PRO:HB2 15 0.21 (1,1019) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:100:SER:HA 17 0.21 (1,1018) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:H 12 0.21 (1,1014) 1:A:7:PHE:H 1:A:7:PHE:HB2 15 0.21 (1,467) 1:A:11:LEU:H 1:A:11:LEU:HB2 17 0.2 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 11 0.2 (1,1168) 1:A:110:GLU:H 1:A:110:GLU:HB2 8 0.2 (1,1111) 1:A:51:LYS:H 1:A:51:LYS:HB2 1 0.2 (1,283) 1:A:156:HIS:H 1:A:156:HIS:HB2 3 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 2 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 15 0.19 (1,199) 1:A:140:ALA:H 1:A:141:GLU:H 18 0.19 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:90:GLY:H 9	(1,177)	1:A:120:VAL:HB	1:A:121:ASP:H	19	0.21
(1,1050) 1:A:17:VAL:HB 1:A:76:PRO:HB2 15 0.21 (1,1019) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:100:SER:HA 17 0.21 (1,1018) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:H 12 0.21 (1,1014) 1:A:7:PHE:H 1:A:7:PHE:HB2 15 0.21 (1,1014) 1:A:7:PHE:H 1:A:7:PHE:HB2 15 0.21 (1,467) 1:A:11:LEU:H 1:A:11:LEU:HB2 17 0.2 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 11 0.2 (1,1168) 1:A:110:GLU:H 1:A:110:GLU:HB2 8 0.2 (1,1111) 1:A:51:LYS:H 1:A:51:LYS:HB2 1 0.2 (1,283) 1:A:156:HIS:H 1:A:156:HIS:HB2 3 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 2 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 15 0.19 (1,199) 1:A:140:ALA:H 1:A:141:GLU:H 18 0.19 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:190:GLY:H 9	(1,1168)	1:A:110:GLU:H	1:A:110:GLU:HB2	3	0.21
(1,1019) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:100:SER:HA 17 0.21 (1,1018) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:H 12 0.21 (1,1014) 1:A:7:PHE:H 1:A:7:PHE:HB2 15 0.21 (1,467) 1:A:11:LEU:H 1:A:11:LEU:HB2 17 0.2 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 11 0.2 (1,1168) 1:A:110:GLU:H 1:A:110:GLU:HB2 8 0.2 (1,1111) 1:A:51:LYS:H 1:A:51:LYS:HB2 1 0.2 (1,283) 1:A:156:HIS:H 1:A:156:HIS:HB2 3 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 2 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 15 0.19 (1,199) 1:A:140:ALA:H 1:A:141:GLU:H 18 0.19 (1,177) 1:A:89:THR:HB 1:A:121:ASP:H 8 0.19 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 9 0.19	(1,1133)	1:A:61:TYR:HA	1:A:70:GLU:HG2	18	0.21
(1,1018) 1:A:9:CYS:HB2 1:A:10:GLU:H 12 0.21 (1,1014) 1:A:7:PHE:H 1:A:7:PHE:HB2 15 0.21 (1,467) 1:A:11:LEU:H 1:A:11:LEU:HB2 17 0.2 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 11 0.2 (1,1168) 1:A:110:GLU:H 1:A:110:GLU:HB2 8 0.2 (1,1111) 1:A:51:LYS:H 1:A:51:LYS:HB2 1 0.2 (1,283) 1:A:156:HIS:H 1:A:156:HIS:HB2 3 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 2 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 9 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 15 0.19 (1,199) 1:A:140:ALA:H 1:A:141:GLU:H 18 0.19 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 8 0.19 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 9 0.19	(1,1050)	1:A:17:VAL:HB	1:A:76:PRO:HB2	15	0.21
(1,1014) 1:A:7:PHE:H 1:A:7:PHE:HB2 15 0.21 (1,467) 1:A:11:LEU:H 1:A:11:LEU:HB2 17 0.2 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 11 0.2 (1,1168) 1:A:110:GLU:H 1:A:10:GLU:HB2 8 0.2 (1,1111) 1:A:51:LYS:H 1:A:51:LYS:HB2 1 0.2 (1,283) 1:A:156:HIS:H 1:A:156:HIS:HB2 3 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 2 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 9 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 15 0.19 (1,199) 1:A:140:ALA:H 1:A:141:GLU:H 18 0.19 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 8 0.19 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 9 0.19	(1,1019)	1:A:9:CYS:HB2	1:A:100:SER:HA	17	0.21
(1,467) 1:A:11:LEU:H 1:A:11:LEU:HB2 17 0.2 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 11 0.2 (1,1168) 1:A:110:GLU:H 1:A:110:GLU:HB2 8 0.2 (1,1111) 1:A:51:LYS:H 1:A:51:LYS:HB2 1 0.2 (1,283) 1:A:156:HIS:H 1:A:156:HIS:HB2 3 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 2 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 9 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 15 0.19 (1,199) 1:A:140:ALA:H 1:A:141:GLU:H 18 0.19 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 8 0.19 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 9 0.19	(1,1018)	1:A:9:CYS:HB2	1:A:10:GLU:H	12	0.21
(1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 11 0.2 (1,1168) 1:A:110:GLU:H 1:A:110:GLU:HB2 8 0.2 (1,1111) 1:A:51:LYS:H 1:A:51:LYS:HB2 1 0.2 (1,283) 1:A:156:HIS:H 1:A:156:HIS:HB2 3 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 2 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 9 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 15 0.19 (1,199) 1:A:140:ALA:H 1:A:141:GLU:H 18 0.19 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 8 0.19 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 9 0.19	(1,1014)	1:A:7:PHE:H	1:A:7:PHE:HB2	15	0.21
(1,1168) 1:A:110:GLU:H 1:A:110:GLU:HB2 8 0.2 (1,1111) 1:A:51:LYS:H 1:A:51:LYS:HB2 1 0.2 (1,283) 1:A:156:HIS:H 1:A:156:HIS:HB2 3 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 2 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 9 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 15 0.19 (1,199) 1:A:140:ALA:H 1:A:141:GLU:H 18 0.19 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 8 0.19 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 9 0.19	(1,467)	1:A:11:LEU:H	1:A:11:LEU:HB2	17	0.2
(1,1111) 1:A:51:LYS:H 1:A:51:LYS:HB2 1 0.2 (1,283) 1:A:156:HIS:H 1:A:156:HIS:HB2 3 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 2 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 9 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 15 0.19 (1,199) 1:A:140:ALA:H 1:A:141:GLU:H 18 0.19 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 8 0.19 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 9 0.19	(1,143)	1:A:89:THR:HB	1:A:90:GLY:H	11	0.2
(1,1111) 1:A:51:LYS:H 1:A:51:LYS:HB2 1 0.2 (1,283) 1:A:156:HIS:H 1:A:156:HIS:HB2 3 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 2 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 9 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 15 0.19 (1,199) 1:A:140:ALA:H 1:A:141:GLU:H 18 0.19 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 8 0.19 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 9 0.19	(1,1168)	1:A:110:GLU:H	1:A:110:GLU:HB2	8	0.2
(1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 2 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 9 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 15 0.19 (1,199) 1:A:140:ALA:H 1:A:141:GLU:H 18 0.19 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 8 0.19 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 9 0.19		1:A:51:LYS:H	1:A:51:LYS:HB2	1	0.2
(1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 9 0.19 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 15 0.19 (1,199) 1:A:140:ALA:H 1:A:141:GLU:H 18 0.19 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 8 0.19 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 9 0.19	(1,283)	1:A:156:HIS:H	1:A:156:HIS:HB2	3	0.19
(1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 15 0.19 (1,199) 1:A:140:ALA:H 1:A:141:GLU:H 18 0.19 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 8 0.19 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 9 0.19	(1,266)	1:A:125:PHE:H	1:A:125:PHE:HB3	2	0.19
(1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 15 0.19 (1,199) 1:A:140:ALA:H 1:A:141:GLU:H 18 0.19 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 8 0.19 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 9 0.19		1:A:125:PHE:H	1:A:125:PHE:HB3	9	0.19
(1,199) 1:A:140:ALA:H 1:A:141:GLU:H 18 0.19 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 8 0.19 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 9 0.19		1:A:125:PHE:H	1:A:125:PHE:HB3	15	0.19
(1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 9 0.19		1:A:140:ALA:H	1:A:141:GLU:H	18	0.19
(1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 9 0.19	(1,177)	1:A:120:VAL:HB	1:A:121:ASP:H	8	0.19
	,	1:A:89:THR:HB	1:A:90:GLY:H	9	0.19
(1,1200) $= 1.71.100.1110.11$ $= 1.71.100.1110.11D2$ $= 11$ $= 0.13$	(1,1209)	1:A:156:HIS:H	1:A:156:HIS:HB2	17	0.19



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1151)	1:A:94:SER:HB2	1:A:95:GLY:H	9	0.19
(1,1150)	1:A:93:PRO:HB2	1:A:94:SER:H	7	0.19
(1,1138)	1:A:70:GLU:HG2	1:A:71:VAL:HA	16	0.19
(1,660)	1:A:58:PHE:HB3	1:A:132:TYR:HE1	2	0.18
(1,273)	1:A:142:THR:H	1:A:142:THR:HB	13	0.18
(1,216)	1:A:159:LEU:H	1:A:160:GLU:H	10	0.18
(1,177)	1:A:120:VAL:HB	1:A:121:ASP:H	4	0.18
(1,177)	1:A:120:VAL:HB	1:A:121:ASP:H	14	0.18
(1,177)	1:A:120:VAL:HB	1:A:121:ASP:H	17	0.18
(1,123)	1:A:69:PHE:HB2	1:A:70:GLU:H	17	0.18
(1,1173)	1:A:114:ASP:HB2	1:A:115:ALA:H	17	0.18
(1,1152)	1:A:96:LYS:H	1:A:96:LYS:HB2	12	0.18
(1,1147)	1:A:83:GLY:HA2	1:A:89:THR:H	19	0.18
(1,1143)	1:A:82:GLU:HB2	1:A:83:GLY:H	8	0.18
(1,1023)	1:A:10:GLU:HB2	1:A:11:LEU:H	3	0.18
(1,1013)	1:A:6:GLN:HB2	1:A:7:PHE:H	15	0.18
(1,467)	1:A:11:LEU:H	1:A:11:LEU:HB2	15	0.17
(1,419)	1:A:119:TRP:HE1	1:A:123:ASN:HD21	1	0.17
(1,286)	1:A:6:GLN:H	1:A:7:PHE:H	10	0.17
(1,283)	1:A:156:HIS:H	1:A:156:HIS:HB2	5	0.17
(1,214)	1:A:155:LEU:HB3	1:A:156:HIS:H	5	0.17
(1,199)	1:A:140:ALA:H	1:A:141:GLU:H	16	0.17
(1,177)	1:A:120:VAL:HB	1:A:121:ASP:H	3	0.17
(1,177)	1:A:120:VAL:HB	1:A:121:ASP:H	7	0.17
(1,1208)	1:A:155:LEU:HB2	1:A:156:HIS:H	15	0.17
(1,1151)	1:A:94:SER:HB2	1:A:95:GLY:H	7	0.17
(1,1147)	1:A:83:GLY:HA2	1:A:89:THR:H	15	0.17
(1,1124)	1:A:53:PRO:HB2	1:A:75:PHE:HB2	7	0.17
(1,1111)	1:A:51:LYS:H	1:A:51:LYS:HB2	4	0.17
(1,105)	1:A:46:LEU:HB2	1:A:47:ALA:H	1	0.17
(1,1018)	1:A:9:CYS:HB2	1:A:10:GLU:H	20	0.17
(1,1014)	1:A:7:PHE:H	1:A:7:PHE:HB2	10	0.17
(1,1013)	1:A:6:GLN:HB2	1:A:7:PHE:H	7	0.17
(1,90)	1:A:28:MET:H	1:A:29:SER:H	20	0.16
(1,666)	1:A:131:ALA:HA	1:A:153:LEU:HB2	20	0.16
(1,663)	1:A:120:VAL:HA	1:A:125:PHE:HB3	20	0.16
(1,387)	1:A:144:PRO:HD3	1:A:145:ASP:H	20	0.16
(1,343)	1:A:97:ALA:HA	1:A:155:LEU:H	20	0.16
(1,266)	1:A:125:PHE:H	1:A:125:PHE:HB3	10	0.16
(1,177)	1:A:120:VAL:HB	1:A:121:ASP:H	5	0.16
(1,177)	1:A:120:VAL:HB	1:A:121:ASP:H	9	0.16
(1,177)	1:A:120:VAL:HB	1:A:121:ASP:H	12	0.16



Continued from previous page...

(1,1173)	1:A:89:THR:HB			
	111110011111111111	1:A:90:GLY:H	8	0.16
	1:A:114:ASP:HB2	1:A:115:ALA:H	3	0.16
(1,1165)	1:A:109:ILE:HG12	1:A:113:TYR:HE1	10	0.16
(1,1133)	1:A:61:TYR:HA	1:A:70:GLU:HG2	9	0.16
(1,1133)	1:A:61:TYR:HA	1:A:70:GLU:HG2	13	0.16
(1,1111)	1:A:51:LYS:H	1:A:51:LYS:HB2	8	0.16
(1,7)	1:A:24:THR:H	1:A:71:VAL:O	10	0.15
(1,599)	1:A:25:GLN:HG2	1:A:26:THR:H	6	0.15
(1,492)	1:A:81:VAL:HB	1:A:82:GLU:H	14	0.15
(1,477)	1:A:118:LYS:H	1:A:118:LYS:HB2	6	0.15
(1,477)	1:A:118:LYS:H	1:A:118:LYS:HB2	12	0.15
(1,373)	1:A:53:PRO:HG2	1:A:54:SER:H	7	0.15
(1,286)	1:A:6:GLN:H	1:A:7:PHE:H	19	0.15
(1,201)	1:A:141:GLU:HB3	1:A:142:THR:H	17	0.15
(1,177)	1:A:120:VAL:HB	1:A:121:ASP:H	6	0.15
(1,123)	1:A:69:PHE:HB2	1:A:70:GLU:H	2	0.15
(1,1203)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HB2	12	0.15
(1,1143)	1:A:82:GLU:HB2	1:A:83:GLY:H	2	0.15
(1,1091)	1:A:36:GLU:HA	1:A:39:TYR:HB2	2	0.15
(1,1050)	1:A:17:VAL:HB	1:A:76:PRO:HB2	9	0.15
(1,105)	1:A:46:LEU:HB2	1:A:47:ALA:H	6	0.15
(1,1023)	1:A:10:GLU:HB2	1:A:11:LEU:H	18	0.15
(1,667)	1:A:39:TYR:HB2	1:A:75:PHE:HE1	15	0.14
(1,666)	1:A:131:ALA:HA	1:A:153:LEU:HB2	2	0.14
(1,633)	1:A:102:TYR:HA	1:A:149:THR:HB	9	0.14
(1,492)	1:A:81:VAL:HB	1:A:82:GLU:H	8	0.14
(1,355)	1:A:140:ALA:H	1:A:142:THR:H	5	0.14
(1,318)	1:A:129:GLY:H	1:A:130:GLU:H	17	0.14
(1,266)	1:A:125:PHE:H	1:A:125:PHE:HB3	7	0.14
(1,266)	1:A:125:PHE:H	1:A:125:PHE:HB3	20	0.14
(1,219)	1:A:6:GLN:H	1:A:6:GLN:HB3	2	0.14
(1,199)	1:A:140:ALA:H	1:A:141:GLU:H	4	0.14
(1,184)	1:A:125:PHE:HB2	1:A:126:ASP:H	12	0.14
(1,1208)	1:A:155:LEU:HB2	1:A:156:HIS:H	18	0.14
(1,1173)	1:A:114:ASP:HB2	1:A:115:ALA:H	2	0.14
(1,1173)	1:A:114:ASP:HB2	1:A:115:ALA:H	20	0.14
(1,1147)	1:A:83:GLY:HA2	1:A:89:THR:H	13	0.14
(1,1138)	1:A:70:GLU:HG2	1:A:71:VAL:HA	11	0.14
(1,1111)	1:A:51:LYS:H	1:A:51:LYS:HB2	5	0.14
(1,105)	1:A:46:LEU:HB2	1:A:47:ALA:H	9	0.14
(1,1027)	1:A:12:LYS:H	1:A:12:LYS:HB2	9	0.14
(1,1013)	1:A:6:GLN:HB2	1:A:7:PHE:H	5	0.14



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

(1,1013) (1,85) (1,553) (1,477) (1,465) (1,465)	1:A:6:GLN:HB2 1:A:24:THR:HB 1:A:51:LYS:HA 1:A:118:LYS:H 1:A:7:PHE:H 1:A:7:PHE:H	1:A:7:PHE:H 1:A:25:GLN:H 1:A:51:LYS:HE2 1:A:118:LYS:HB2	6 20 20	0.14 0.13 0.13
(1,553) (1,477) (1,465) (1,465)	1:A:51:LYS:HA 1:A:118:LYS:H 1:A:7:PHE:H	1:A:51:LYS:HE2 1:A:118:LYS:HB2		
(1,477) (1,465) (1,465)	1:A:118:LYS:H 1:A:7:PHE:H	1:A:118:LYS:HB2	20	0.19
(1,465) (1,465)	1:A:7:PHE:H			0.15
(1,465)			9	0.13
,	1. Л.7. ДИГ. Ц	1:A:7:PHE:HB3	1	0.13
(1 (17)	1.A.(.1 1112.11	1:A:7:PHE:HB3	3	0.13
(1,417)	1:A:123:ASN:H	1:A:123:ASN:HD22	2	0.13
(1,387)	1:A:144:PRO:HD3	1:A:145:ASP:H	8	0.13
(1,387)	1:A:144:PRO:HD3	1:A:145:ASP:H	11	0.13
(1,378)	1:A:96:LYS:HD3	1:A:97:ALA:H	8	0.13
(1,341)	1:A:127:LEU:HB2	1:A:129:GLY:H	5	0.13
(1,286)	1:A:6:GLN:H	1:A:7:PHE:H	13	0.13
(1,286)	1:A:6:GLN:H	1:A:7:PHE:H	18	0.13
(1,285)	1:A:160:GLU:H	1:A:160:GLU:HA	12	0.13
(1,273)	1:A:142:THR:H	1:A:142:THR:HB	4	0.13
(1,219)	1:A:6:GLN:H	1:A:6:GLN:HB3	20	0.13
(1,199)	1:A:140:ALA:H	1:A:141:GLU:H	1	0.13
(1,177)	1:A:120:VAL:HB	1:A:121:ASP:H	15	0.13
(1,1194)	1:A:141:GLU:HB2	1:A:142:THR:H	9	0.13
(1,1150)	1:A:93:PRO:HB2	1:A:94:SER:H	2	0.13
(1,1143)	1:A:82:GLU:HB2	1:A:83:GLY:H	18	0.13
(1,1133)	1:A:61:TYR:HA	1:A:70:GLU:HG2	16	0.13
(1,1119)	1:A:51:LYS:HE2	1:A:81:VAL:HG11	17	0.13
(1,1119)	1:A:51:LYS:HE2	1:A:81:VAL:HG12	17	0.13
(1,1119)	1:A:51:LYS:HE2	1:A:81:VAL:HG13	17	0.13
(1,1114)	1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HE2	12	0.13
(1,1091)	1:A:36:GLU:HA	1:A:39:TYR:HB2	11	0.13
(1,1038)	1:A:13:GLU:HB2	1:A:14:LEU:H	19	0.13
(1,1023)	1:A:10:GLU:HB2	1:A:11:LEU:H	5	0.13
(1,1023)	1:A:10:GLU:HB2	1:A:11:LEU:H	16	0.13
(1,1011)	1:A:6:GLN:H	1:A:6:GLN:HB2	1	0.13
(1,1007)	1:A:2:ASP:HB2	1:A:3:PHE:HB2	7	0.13
(1,7)	1:A:24:THR:H	1:A:71:VAL:O	18	0.12
(1,668)	1:A:39:TYR:HB3	1:A:75:PHE:HE1	9	0.12
(1,553)	1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HE2	16	0.12
(1,473)	1:A:103:ILE:H	1:A:103:ILE:HB	18	0.12
· · /	1:A:144:PRO:HD3	1:A:145:ASP:H	4	0.12
	1:A:144:PRO:HG3	1:A:145:ASP:H	5	0.12
(1,378)	1:A:96:LYS:HD3	1:A:97:ALA:H	4	0.12
(1,320)	1:A:145:ASP:H	1:A:146:GLN:H	17	0.12
(1,286)	1:A:6:GLN:H	1:A:7:PHE:H	17	0.12
(1,285)	1:A:160:GLU:H	1:A:160:GLU:HA	14	0.12



Continued from previous page...

(1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 3 0.12 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 11 0.12 (1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB3 16 0.12 (1,244) 1:A:66:THR:H 1:A:68:THR:HB 12 0.12 (1,244) 1:A:65:THR:H 1:A:68:THR:HB 12 0.12 (1,216) 1:A:159:LEU:H 1:A:160:GLU:H 6 0.12 (1,214) 1:A:159:LEU:HB3 1:A:156:HIS:H 4 0.12 (1,199) 1:A:140:ALA:H 1:A:141:GLU:H 15 0.12 (1,184) 1:A:155:LEU:HB3 1:A:156:HIS:H 4 0.12 (1,184) 1:A:155:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 16 0.12 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 10 0.12 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 10 0.12 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 11 0.12 (1,1143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 2 0.12 (1,1193) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB2 16 0.12 (1,1190) 1:A:138:ASN:H 1:A:138:ASN:HB2 9 0.12 (1,1190) 1:A:138:ASN:H 1:A:138:ASN:HB2 9 0.12 (1,1191) 1:A:141:ASP:HB2 1:A:122:ASP:H 8 0.12 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 6 0.12 (1,1135) 1:A:64:MET:HB2 1:A:141:GLU:H 13 0.12 (1,1095) 1:A:45:LEU:HB2 1:A:445:EU:HB2 13 0.12 (1,1095) 1:A:45:LEU:HB2 1:A:141:GLU:H 20 0.12 (1,1097) 1:A:12:INS:H 1:A:12:INS:HB2 12 (1,012) (1,013) 1:A:6:GLN:HB2 1:A:141:EU:H 20 0.12 (1,1013) 1:A:6:GLN:HB2 1:A:141:EU:H 20 0.11 (1,022) (1,1033) 1:A:6:GLN:HB2 1:A:141:EU:H 20 0.11 (1,033) 1:A:10:2:INS:H 1:A:12:INS:HB 1 0.11 (1,043) 1:A:13:IAI:A:HB 1:A:13:IAI:HB 1 1:A:13:IBI:HB 1 0.11 (1,633) 1:A:13:IAI:A:HB 1:A:13:IBI:HB 1 0.11 (1,644) 1:A:10:IBI:HB 1:A:13:IBI:HB 1 0.11 (1,647) 1:A:13:IBI:HB 1:A:13:IBI:HB 1 0.11 (1,647) 1:	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,266) 1:A:125:PHE:H 1:A:68:THR:HB 12 0.12 (1,214) 1:A:68:THR:H 1:A:68:THR:HB 12 0.12 (1,216) 1:A:159:LEU:H 1:A:160:GLU:H 6 0.12 (1,214) 1:A:155:LEU:HB 1:A:160:GLU:H 6 0.12 (1,144) 1:A:155:LEU:HB 1:A:160:GLU:H 15 0.12 (1,199) 1:A:140:ALA:H 1:A:141:GLU:H 15 0.12 (1,199) 1:A:140:ALA:H 1:A:141:GLU:H 15 0.12 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 16 0.12 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 10 0.12 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 11 0.12 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:90:GLY:H 2 0.12 (1,1193) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 2 0.12 (1,1193) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB2 16 0.12 (1,1190) 1:A:138:ASN:H 1:A:138:ASN:HB2 9 0.12 (1,1190) 1:A:138:ASP:HB2 1:A:122:ASP:H 8 0.12 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:15:ALA:H 14 0.12 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:14:ASP:HB2 1:A:15:ALA:H 13 0.12 (1,1095) 1:A:45:LEU:HB2 1:A:44:AAT:ALA:H 13 0.12 (1,1095) 1:A:45:LEU:HB2 1:A:14:LEU:H 20 0.12 (1,1007) 1:A:12:LYS:HB 1:A:12:LYS:HB2 1:A:14:LEU:H 20 0.12 (1,1007) 1:A:12:LYS:H 1:A:12:LYS:HB2 1:A:14:LEU:H 20 0.12 (1,1009) 1:A:2:SPS:HB3 1:A:3:PHE:HB3 1 0.12 (1,1009) 1:A:2:SPS:HB3 1:A:3:PHE:HB3 1 0.12 (1,009) 1:A:2:ASP:HB3 1:A:3:PHE:HB3 1 0.12 (1,009) 1:A:2:ASP:HB3 1:A:3:PHE:HB3 1 0.12 (1,009) 1:A:2:CFTR:H 1:A:69:PHE:O 20 0.11 (1,666) 1:A:31:ALA:HA 1:A:153:LEU:HB 2 14 0.11 (1,633) 1:A:6:SLU:HB2 1:A:14:EU:H 20 0.11 (1,644) 1:A:108:GLU:HG2 1:A:109:ILE:H 10 0.11 (1,644) 1:A:108:GLU:HG2 1:A:109:ILE:H 10 0.11 (1,647) 1:A:108:GLU:HG2 1:A:109:ILE:H 10 0.11 (1,649) 1:A:15:LYS:HA 1:A:153:LEU:HB 11 0.11 (1,641) 1:A:108:GLU:HG2 1:A:109:ILE:H 10 0.11 (1,566) 1:A:31:ALA:HB 1:A:145:ILYS:HB3 17 0.11 (1,633) 1:A:6:GLD:HB2 1:A:145:ASP:HB 18 0.11 (1,473) 1:A:6:GLD:HB2 1:A:145:ASP:HB3 1 0.11 (1,566) 1:A:31:ALA:HB 1:A:145:ILYS:HB3 17 0.11 (1,566) 1:A:31:ALA:HB 1:A:145:ILYS:HB3 17 0.11 (1,566) 1:A:151:LYS:HB3 17 0.11 (1,566) 1:A:151:LYS:HB3 17 0.11 (1,576) 1:A:195:GLU:H 11:A:103:ILE:H 10 0.11 (1,577) 1:A:196:LYS:HB3 11:A:195:ASP:H 19 0.11 (1,57	(1,266)	1:A:125:PHE:H	1:A:125:PHE:HB3	3	0.12
(1,244) 1:A:68:THR:H 1:A:68:THR:HB 12 0.12 (1,216) 1:A:159:LEU:H 1:A:160:GLU:H 6 0.12 (1,214) 1:A:155:LEU:HB3 1:A:156:HIS:H 4 0.12 (1,199) 1:A:140:ALA:H 1:A:126:ASP:H 15 0.12 (1,184) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 10 0.12 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 10 0.12 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 11 0.12 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 10 0.12 (1,177) 1:A:1320:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 11 0.12 (1,113) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB2 16 0.12 (1,1193) 1:A:141:ASP:HB2 1:A:141:ASASH:HB2 16 0.12 (1,113) 1:A:14:ASP:HB2 1:A:15:ALA:H 4 0.12 (1,113) 1:A:46:EU:HB2 1:A:15:AMET:H 6 0.12 (1,1113) 1:A:46:EU:HB2 1:A:48:EW:HB2 <th< td=""><td>(1,266)</td><td>1:A:125:PHE:H</td><td>1:A:125:PHE:HB3</td><td>11</td><td>0.12</td></th<>	(1,266)	1:A:125:PHE:H	1:A:125:PHE:HB3	11	0.12
(1,216) 1:A:159:LEU:H 1:A:160:GLU:H 6 0.12 (1,214) 1:A:155:LEU:HB3 1:A:156:HIS:H 4 0.12 (1,199) 1:A:140:ALA:H 1:A:141:GLU:H 15 0.12 (1,184) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 10 0.12 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 10 0.12 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 11 0.12 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:HB 10 0.12 (1,177) 1:A:141:GLU:H 1:A:121:ASP:HB 1:A:190:GLY:H 2 0.12 (1,113) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB2 16 0.12 (1,1181) 1:A:143:PHB2 1:A:143:SSN:HB2 9 0.12 (1,1173) 1:A:144:ASP:HB2 1:A:154.AA:H 14 0.12 (1,113) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154.AA:H 14 0.12 (1,113) 1:A:45:LEU:HB2 1:A:45:LEV:HB2 13 0.12 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 <th< td=""><td>(1,266)</td><td>1:A:125:PHE:H</td><td>1:A:125:PHE:HB3</td><td>16</td><td>0.12</td></th<>	(1,266)	1:A:125:PHE:H	1:A:125:PHE:HB3	16	0.12
(1,214) 1:A:155:LEU:HB3 1:A:156:HIS:H 4 0.12 (1,199) 1:A:140:ALA:H 1:A:141:GLU:H 15 0.12 (1,184) 1:A:120:VAL:HB 1:A:126:ASP:H 16 0.12 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 10 0.12 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 11 0.12 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 2 0.12 (1,177) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB2 16 0.12 (1,113) 1:A:341:GLU:H 1:A:141:GLU:HB2 16 0.12 (1,1190) 1:A:138:ASN:H 1:A:138:ASN:HB2 9 0.12 (1,1181) 1:A:121:ASP:HB2 1:A:151:ALA:H 14 0.12 (1,1173) 1:A:46:MET:HG2 1:A:151:ALA:H 14 0.12 (1,1133) 1:A:46:MET:HG2 1:A:47:ALA:H 13 0.12 (1,1133) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 13 0.12 (1,1133) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:AL:H	(1,244)	1:A:68:THR:H	1:A:68:THR:HB	12	0.12
(1,199) 1:A:140:ALA:H 1:A:141:GLU:H 15 0.12 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 16 0.12 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 10 0.12 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 10 0.12 (1,117) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 11 0.12 (1,113) 1:A:141:GLU:HB 1:A:120:VHB2 0.12 (1,1190) 1:A:138:ASN:H 1:A:138:ASN:HB2 9 0.12 (1,1181) 1:A:121:ASP:HB2 1:A:152:ASP:H 8 0.12 (1,1173) 1:A:141:ASP:HB2 1:A:154:MET:H 6 0.12 (1,113) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 6 0.12 (1,113) 1:A:64:MET:HG2 1:A:151:YS:HD2 13 0.12 (1,113) 1:A:64:LEU:HB2 1:A:451:LYS:HD2 13 0.12 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 13 0.12 (1,103) 1:A:64:DU:HB2 1:A:47:ALA:H 13 <	(1,216)	1:A:159:LEU:H	1:A:160:GLU:H	6	0.12
(1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 16 0.12 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 10 0.12 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 10 0.12 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:HB 11 0.12 (1,177) 1:A:1320:VAL:HB 1:A:121:ASP:HB 11 0.12 (1,113) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB2 16 0.12 (1,1193) 1:A:138:ASN:H 1:A:138:ASN:HB2 9 0.12 (1,1181) 1:A:138:ASP:HB2 1:A:138:ASN:HB2 9 0.12 (1,1183) 1:A:141:ASP:HB2 1:A:15:ALA:H 4 0.12 (1,113) 1:A:64:MET:HG2 1:A:15:AWET:H 6 0.12 (1,113) 1:A:45:LEU:HB2 1:A:45:LEV:HB2 13 0.12 (1,1095) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 13 0.12 (1,1038) 1:A:31:GLU:HB2 1:A:47:PHE:H 13 0.12 (1,1037) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:PHE:H	(1,214)	1:A:155:LEU:HB3	1:A:156:HIS:H	4	0.12
(1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 10 0.12 (1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 11 0.12 (1,143) 1:A:20:VAL:HB 1:A:00:GLY:H 2 0.12 (1,1193) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB2 16 0.12 (1,1190) 1:A:138:ASN:H 1:A:138:ASN:HB2 9 0.12 (1,1181) 1:A:121:ASP:HB2 1:A:121:ASP:HB2 0.12 (1,1173) 1:A:14:ASP:HB2 1:A:15:ALA:H 14 0.12 (1,1135) 1:A:46:MET:HG2 1:A:15:AWET:H 6 0.12 (1,1133) 1:A:45:LEU:HB2 1:A:45:LYS:HD2 13 0.12 (1,1095) 1:A:45:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 13 0.12 (1,1075) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 13 0.12 (1,1027) 1:A:12:LYS:H 1:A:12:LYS:HB2 12 0.12 (1,1013) 1:A:6:GLN:HB2 1:A:7:PHE:H 4 0.12 (1,1009) 1:A:2:2:ASP:HB3 1:A:7:PHE:H 4	(1,199)	1:A:140:ALA:H	1:A:141:GLU:H	15	0.12
(1,177) 1:A:120:VAL:HB 1:A:121:ASP:H 11 0.12 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 2 0.12 (1,1193) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB2 16 0.12 (1,1190) 1:A:138:ASN:H 1:A:138:ASN:HB2 9 0.12 (1,1181) 1:A:121:ASP:HB2 1:A:121:ASP:HB 8 0.12 (1,1173) 1:A:14:ASP:HB2 1:A:15:ALA:H 14 0.12 (1,1133) 1:A:45:LEV:HB2 1:A:15:MET:H 6 0.12 (1,1133) 1:A:45:LEU:HB2 1:A:45:LEYS:HD2 13 0.12 (1,1095) 1:A:45:LEU:HB2 1:A:44:LEU:H 20 0.12 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 13 0.12 (1,1027) 1:A:12:LYS:H 1:A:12:LYS:HB2 12 0.12 (1,1007) 1:A:2:GCHN:HB2 1:A:7:PHE:H 4 0.12 (1,1009) 1:A:2:G:THR:HB 1:A:3:PHE:HB3 1 0.12 (1,566) 1:A:13:1:ALA:HA 1:A:153:LEU:HB2	(1,184)	1:A:125:PHE:HB2	1:A:126:ASP:H	16	0.12
(1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 2 0.12 (1,1193) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB2 16 0.12 (1,1190) 1:A:138:ASN:H 1:A:138:ASN:HB2 9 0.12 (1,1181) 1:A:121:ASP:HB2 1:A:122:ASP:H 8 0.12 (1,1173) 1:A:141:ASP:HB2 1:A:15:ALA:H 14 0.12 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:15:Y:HD2 13 0.12 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:15:LYS:HD2 13 0.12 (1,1055) 1:A:45:LEU:HB2 1:A:84:SER:HB2 5 0.12 (1,1055) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 13 0.12 (1,1056) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:14:LEU:H 20 0.12 (1,1077) 1:A:12:LYS:H 1:A:12:LYS:HB2 12 0.12 (1,1009) 1:A:2:6:THR:H 1:A:6:9:PHE:O 20 0.11 (1,666) 1:A:13:ALA:HA 1:A:15:B:LEU:HB2 14 0.11 (1,666) 1:A:102:TYR:HA 1:A:109:ILE:H	(1,177)	1:A:120:VAL:HB	1:A:121:ASP:H	10	0.12
(1,1193) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB2 16 0.12 (1,1190) 1:A:138:ASN:H 1:A:138:ASN:HB2 9 0.12 (1,1181) 1:A:121:ASP:HB2 1:A:122:ASP:H 8 0.12 (1,1173) 1:A:14:ASP:HB2 1:A:15:ALA:H 14 0.12 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:15:MET:H 6 0.12 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:15:LYS:HD2 13 0.12 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:15:LYS:HD2 13 0.12 (1,1035) 1:A:45:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HD2 13 0.12 (1,1095) 1:A:45:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 13 0.12 (1,1038) 1:A:13:GLU:HB2 1:A:14:LEU:H 20 0.12 (1,1027) 1:A:13:GLU:HB2 1:A:14:LEU:H 20 0.12 (1,1013) 1:A:6:GLN:HB2 1:A:7:PHE:H 4 0.12 (1,1009) 1:A:2:GSTHR:H 1:A:6:PHE:O 20 0.11 (1,666) 1:A:131:ALA:HA 1:A:14:9:THR:HB	(1,177)	1:A:120:VAL:HB	1:A:121:ASP:H	11	0.12
(1,1190) 1:A:138:ASN:H 1:A:138:ASN:HB2 9 0.12 (1,1181) 1:A:121:ASP:HB2 1:A:122:ASP:H 8 0.12 (1,1173) 1:A:14:ASP:HB2 1:A:15:ALA:H 14 0.12 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:15:LYS:HD2 13 0.12 (1,113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:55:LYS:HD2 13 0.12 (1,1095) 1:A:45:LEU:HB2 1:A:84:SER:HB2 5 0.12 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 13 0.12 (1,1038) 1:A:13:GLU:HB2 1:A:14:LEU:H 20 0.12 (1,1027) 1:A:12:LYS:H 1:A:12:LYS:HB2 12 0.12 (1,1013) 1:A:6:GLN:HB2 1:A:7:PHE:H 4 0.12 (1,1009) 1:A:26:THR:H 1:A:69:PHE:O 20 0.11 (1,506) 1:A:13:ALA:HA 1:A:153:LEU:HB2 14 0.11 (1,666) 1:A:13:ALA:HA 1:A:109:ILE:H 10 0.11 (1,556) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HB3 <td< td=""><td>(1,143)</td><td>1:A:89:THR:HB</td><td>1:A:90:GLY:H</td><td>2</td><td>0.12</td></td<>	(1,143)	1:A:89:THR:HB	1:A:90:GLY:H	2	0.12
(1,1181) 1:A:121:ASP:HB2 1:A:122:ASP:H 8 0.12 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 14 0.12 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 6 0.12 (1,113) 1:A:651:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 13 0.12 (1,1095) 1:A:45:LEU:HB2 1:A:84:SER:HB2 5 0.12 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 13 0.12 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 13 0.12 (1,1038) 1:A:13:GLU:HB2 1:A:41:EU:H 20 0.12 (1,1027) 1:A:12:LYS:H 1:A:12:LYS:HB2 12 0.12 (1,103) 1:A:6:GLN:HB2 1:A:7:PHE:H 4 0.12 (1,1009) 1:A:2:ASP:HB3 1:A:3:PHE:HB3 1 0.12 (1,9) 1:A:2:6:THR:H 1:A:6:9:PHE:O 20 0.11 (1,666) 1:A:131:ALA:HA 1:A:149:THR:HB 11 0.11 (1,633) 1:A:10:C:TYR:HA 1:A:109:ILE:H 10	(1,1193)	1:A:141:GLU:H	1:A:141:GLU:HB2	16	0.12
(1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 14 0.12 (1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 6 0.12 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 13 0.12 (1,1095) 1:A:45:LEU:HB2 1:A:84:SER:HB2 5 0.12 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 13 0.12 (1,1038) 1:A:13:GLU:HB2 1:A:14:LEU:H 20 0.12 (1,1027) 1:A:12:LYS:H 1:A:12:LYS:HB2 12 0.12 (1,1013) 1:A:6:GLN:HB2 1:A:7:PHE:H 4 0.12 (1,1009) 1:A:2:ASP:HB3 1:A:3:PHE:HB3 1 0.12 (1,9) 1:A:26:THR:H 1:A:69:PHE:O 20 0.11 (1,666) 1:A:131:ALA:HA 1:A:153:LEU:HB2 14 0.11 (1,633) 1:A:102:TYR:HA 1:A:109:ILE:H 10 0.11 (1,556) 1:A:51:LYS:HA 1:A:151:LYS:HB3 17 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 5 </td <td>(1,1190)</td> <td>1:A:138:ASN:H</td> <td>1:A:138:ASN:HB2</td> <td>9</td> <td>0.12</td>	(1,1190)	1:A:138:ASN:H	1:A:138:ASN:HB2	9	0.12
(1,1135) 1:A:64:MET:HG2 1:A:154:MET:H 6 0.12 (1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 13 0.12 (1,1095) 1:A:45:LEU:HB2 1:A:48:SER:HB2 5 0.12 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 13 0.12 (1,1038) 1:A:13:GLU:HB2 1:A:14:LEU:H 20 0.12 (1,1027) 1:A:12:LYS:H 1:A:7:PHE:H 20 0.12 (1,1013) 1:A:6:GLN:HB2 1:A:7:PHE:H 4 0.12 (1,1009) 1:A:2:ASP:HB3 1:A:3:PHE:HB3 1 0.12 (1,90) 1:A:26:THR:H 1:A:69:PHE:O 20 0.11 (1,666) 1:A:131:ALA:HA 1:A:193:LEU:HB2 14 0.11 (1,666) 1:A:102:TYR:HA 1:A:109:ILE:H 10 0.11 (1,661) 1:A:108:GLU:HG2 1:A:109:ILE:H 10 0.11 (1,556) 1:A:51:LYS:HA 1:A:26:THR:HB 18 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 5	(1,1181)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:122:ASP:H	8	0.12
(1,1113) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HD2 13 0.12 (1,1095) 1:A:45:LEU:HB2 1:A:84:SER:HB2 5 0.12 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 13 0.12 (1,1038) 1:A:13:GLU:HB2 1:A:14:LEU:H 20 0.12 (1,1027) 1:A:12:LYS:H 1:A:12:LYS:HB2 12 0.12 (1,1013) 1:A:6:GLN:HB2 1:A:7:PHE:H 4 0.12 (1,1009) 1:A:2:ASP:HB3 1:A:3:PHE:HB3 1 0.12 (1,9) 1:A:26:THR:H 1:A:69:PHE:O 20 0.11 (1,666) 1:A:131:ALA:HA 1:A:195:LEU:HB2 14 0.11 (1,666) 1:A:102:TYR:HA 1:A:109:ILE:H 10 0.11 (1,633) 1:A:102:TYR:HA 1:A:109:ILE:H 10 0.11 (1,556) 1:A:51:LYS:HA 1:A:109:ILE:H 10 0.11 (1,556) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 5 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 5	(1,1173)	1:A:114:ASP:HB2	1:A:115:ALA:H	14	0.12
(1,1095) 1:A:445:LEU:HB2 1:A:84:SER:HB2 5 0.12 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 13 0.12 (1,1038) 1:A:13:GLU:HB2 1:A:14:LEU:H 20 0.12 (1,1027) 1:A:12:LYS:H 1:A:12:LYS:HB2 12 0.12 (1,1013) 1:A:6:GLN:HB2 1:A:7:PHE:H 4 0.12 (1,1009) 1:A:2:ASP:HB3 1:A:3:PHE:HB3 1 0.12 (1,9) 1:A:2:6:THR:H 1:A:6:9:PHE:O 20 0.11 (1,666) 1:A:131:ALA:HA 1:A:153:LEU:HB2 14 0.11 (1,666) 1:A:102:TYR:HA 1:A:149:THR:HB 11 0.11 (1,666) 1:A:102:TYR:HA 1:A:199:ILE:H 10 0.11 (1,661) 1:A:108:GLU:HG2 1:A:199:ILE:H 10 0.11 (1,556) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HE3 17 0.11 (1,596) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 5 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 5 <td>` '</td> <td>1:A:64:MET:HG2</td> <td>1:A:154:MET:H</td> <td>6</td> <td>0.12</td>	` '	1:A:64:MET:HG2	1:A:154:MET:H	6	0.12
(1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 13 0.12 (1,1038) 1:A:13:GLU:HB2 1:A:14:LEU:H 20 0.12 (1,1027) 1:A:12:LYS:H 1:A:12:LYS:HB2 12 0.12 (1,1013) 1:A:6:GLN:HB2 1:A:7:PHE:H 4 0.12 (1,1009) 1:A:2ASP:HB3 1:A:3:PHE:HB3 1 0.12 (1,90) 1:A:26:THR:H 1:A:69:PHE:O 20 0.11 (1,666) 1:A:131:ALA:HA 1:A:153:LEU:HB2 14 0.11 (1,666) 1:A:102:TYR:HA 1:A:49:THR:HB 11 0.11 (1,633) 1:A:102:TYR:HA 1:A:109:ILE:H 10 0.11 (1,664) 1:A:108:GLU:HG2 1:A:109:ILE:H 10 0.11 (1,556) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HE3 17 0.11 (1,566) 1:A:25:GLN:HA 1:A:26:THR:HB 18 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 5 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:103:ILE:HB 9	(1,1113)	1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HD2	13	0.12
(1,1038) 1:A:13:GLU:HB2 1:A:14:LEU:H 20 0.12 (1,1027) 1:A:12:LYS:H 1:A:12:LYS:HB2 12 0.12 (1,1013) 1:A:6:GLN:HB2 1:A:7:PHE:H 4 0.12 (1,1009) 1:A:2:ASP:HB3 1:A:3:PHE:HB3 1 0.12 (1,9) 1:A:26:THR:H 1:A:69:PHE:O 20 0.11 (1,666) 1:A:131:ALA:HA 1:A:153:LEU:HB2 14 0.11 (1,663) 1:A:108:GLU:HG2 1:A:109:ILE:H 10 0.11 (1,614) 1:A:108:GLU:HG2 1:A:109:ILE:H 10 0.11 (1,556) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HE3 17 0.11 (1,506) 1:A:25:GLN:HA 1:A:26:THR:HB 18 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 5 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 5 0.11 (1,492) 1:A:181:VAL:HB 1:A:182:GLU:H 4 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:182:GLU:H 9	· · /	1:A:45:LEU:HB2	1:A:84:SER:HB2	5	0.12
(1,1027) 1:A:12:LYS:H 1:A:12:LYS:HB2 12 0.12 (1,1013) 1:A:6:GLN:HB2 1:A:7:PHE:H 4 0.12 (1,1009) 1:A:2:ASP:HB3 1:A:3:PHE:HB3 1 0.12 (1,9) 1:A:26:THR:H 1:A:69:PHE:O 20 0.11 (1,666) 1:A:131:ALA:HA 1:A:153:LEU:HB2 14 0.11 (1,633) 1:A:102:TYR:HA 1:A:149:THR:HB 11 0.11 (1,614) 1:A:108:GLU:HG2 1:A:109:ILE:H 10 0.11 (1,556) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HE3 17 0.11 (1,506) 1:A:25:GLN:HA 1:A:26:THR:HB 18 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 5 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 13 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 13 0.11 (1,493) 1:A:103:ILE:H 1:A:103:ILE:HB 9 0.11 (1,473) 1:A:103:ASN:H 1:A:123:ASN:HD21 19	(1,105)	1:A:46:LEU:HB2	1:A:47:ALA:H	13	0.12
(1,1013) 1:A:6:GLN:HB2 1:A:7:PHE:H 4 0.12 (1,1009) 1:A:2:ASP:HB3 1:A:3:PHE:HB3 1 0.12 (1,9) 1:A:26:THR:H 1:A:69:PHE:O 20 0.11 (1,666) 1:A:131:ALA:HA 1:A:153:LEU:HB2 14 0.11 (1,633) 1:A:102:TYR:HA 1:A:149:THR:HB 11 0.11 (1,614) 1:A:108:GLU:HG2 1:A:109:ILE:H 10 0.11 (1,564) 1:A:51:LYS:HA 1:A:109:ILE:H 10 0.11 (1,556) 1:A:51:LYS:HA 1:A:26:THR:HB 18 0.11 (1,506) 1:A:25:GLN:HA 1:A:82:GLU:H 5 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 5 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 5 0.11 (1,473) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 4 0.11 (1,473) 1:A:103:ILE:H 1:A:103:ILE:HB 9 0.11 (1,474) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD21 19	(1,1038)	1:A:13:GLU:HB2	1:A:14:LEU:H	20	0.12
(1,1009) 1:A:2:ASP:HB3 1:A:3:PHE:HB3 1 0.12 (1,9) 1:A:26:THR:H 1:A:69:PHE:O 20 0.11 (1,666) 1:A:131:ALA:HA 1:A:153:LEU:HB2 14 0.11 (1,633) 1:A:102:TYR:HA 1:A:149:THR:HB 11 0.11 (1,614) 1:A:108:GLU:HG2 1:A:109:ILE:H 10 0.11 (1,556) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HE3 17 0.11 (1,506) 1:A:25:GLN:HA 1:A:26:THR:HB 18 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 5 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 13 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 5 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 4 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 4 0.11 (1,473) 1:A:810:ILE:H 1:A:103:ILE:HB 9 0.11 (1,473) 1:A:198:ALA:O 1:A:153:LEU:HB 9 <	(1,1027)	1:A:12:LYS:H	1:A:12:LYS:HB2	12	0.12
(1,9) 1:A:26:THR:H 1:A:69:PHE:O 20 0.11 (1,666) 1:A:131:ALA:HA 1:A:153:LEU:HB2 14 0.11 (1,633) 1:A:102:TYR:HA 1:A:149:THR:HB 11 0.11 (1,614) 1:A:108:GLU:HG2 1:A:109:ILE:H 10 0.11 (1,556) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HE3 17 0.11 (1,506) 1:A:25:GLN:HA 1:A:26:THR:HB 18 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 5 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 13 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 13 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 4 0.11 (1,492) 1:A:103:ILE:H 1:A:103:ILE:HB 9 0.11 (1,492) 1:A:103:ILE:H 1:A:103:ILE:HB 9 0.11 (1,473) 1:A:19:TRP:HE1 1:A:123:ASN:HD21 19 0.11 (1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:143:ASN:HD22 18	(1,1013)	1:A:6:GLN:HB2	1:A:7:PHE:H	4	0.12
(1,666) 1:A:131:ALA:HA 1:A:153:LEU:HB2 14 0.11 (1,633) 1:A:102:TYR:HA 1:A:149:THR:HB 11 0.11 (1,614) 1:A:108:GLU:HG2 1:A:109:ILE:H 10 0.11 (1,556) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HE3 17 0.11 (1,506) 1:A:25:GLN:HA 1:A:26:THR:HB 18 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 5 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 13 0.11 (1,492) 1:A:103:ILE:H 1:A:103:ILE:HB 9 0.11 (1,473) 1:A:103:ILE:H 1:A:103:ILE:HB 9 0.11 (1,473) 1:A:198:ALA:O 1:A:153:LEU:H 4 0.11 (1,419) 1:A:119:TRP:HE1 1:A:123:ASN:HD21 19 0.11 (1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 18 0.11 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 19 0.11 (1,378) 1:A:96:LYS:HD3 1:A:97:ALA:H <t< td=""><td>(1,1009)</td><td>1:A:2:ASP:HB3</td><td>1:A:3:PHE:HB3</td><td>1</td><td>0.12</td></t<>	(1,1009)	1:A:2:ASP:HB3	1:A:3:PHE:HB3	1	0.12
(1,633) 1:A:102:TYR:HA 1:A:149:THR:HB 11 0.11 (1,614) 1:A:108:GLU:HG2 1:A:109:ILE:H 10 0.11 (1,556) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HE3 17 0.11 (1,506) 1:A:25:GLN:HA 1:A:26:THR:HB 18 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 5 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 13 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 13 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 13 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:103:ILE:HB 9 0.11 (1,473) 1:A:103:ILE:H 1:A:103:ILE:HB 9 0.11 (1,43) 1:A:98:ALA:O 1:A:153:LEU:H 4 0.11 (1,419) 1:A:119:TRP:HE1 1:A:123:ASN:HD21 19 0.11 (1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 18 0.11 (1,378) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 19 <td>(1,9)</td> <td>1:A:26:THR:H</td> <td>1:A:69:PHE:O</td> <td>20</td> <td>0.11</td>	(1,9)	1:A:26:THR:H	1:A:69:PHE:O	20	0.11
(1,614) 1:A:108:GLU:HG2 1:A:109:ILE:H 10 0.11 (1,556) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HE3 17 0.11 (1,506) 1:A:25:GLN:HA 1:A:26:THR:HB 18 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 5 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 13 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 13 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 13 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:14:GLU:H 4 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:14 0.11 (1,473) 1:A:103:ILE:H 1:A:103:ILE:HB 9 0.11 (1,43) 1:A:198:ALA:O 1:A:153:LEU:H 4 0.11 (1,419) 1:A:119:TRP:HE1 1:A:123:ASN:HD21 19 0.11 (1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:145:ASP:H 19 0.11 (1,378) 1:A:96:LYS:HD3 1:A:97:ALA:H 12 0.11	(1,666)	1:A:131:ALA:HA	1:A:153:LEU:HB2	14	0.11
(1,556) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HE3 17 0.11 (1,506) 1:A:25:GLN:HA 1:A:26:THR:HB 18 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 5 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 13 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 13 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 13 0.11 (1,473) 1:A:103:ILE:H 13 0.11 (1,473) 1:A:103:ILE:H 14 0.11 (1,433) 1:A:98:ALA:O 1:A:153:LEU:H 4 0.11 (1,419) 1:A:119:TRP:HE1 1:A:123:ASN:HD21 19 0.11 (1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 18 0.11 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 19 0.11 (1,377) 1:A:96:LYS:HD3 1:A:97:ALA:H 3 0.11 (1,333) 1:A:84:SER:H 1:A:87:VAL:HB 16 0.11 (1,285) <td>(1,633)</td> <td>1:A:102:TYR:HA</td> <td>1:A:149:THR:HB</td> <td>11</td> <td>0.11</td>	(1,633)	1:A:102:TYR:HA	1:A:149:THR:HB	11	0.11
(1,506) 1:A:25:GLN:HA 1:A:26:THR:HB 18 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 5 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 13 0.11 (1,473) 1:A:103:ILE:H 1:A:103:ILE:HB 9 0.11 (1,43) 1:A:98:ALA:O 1:A:153:LEU:H 4 0.11 (1,419) 1:A:119:TRP:HE1 1:A:123:ASN:HD21 19 0.11 (1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 18 0.11 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 19 0.11 (1,378) 1:A:96:LYS:HD3 1:A:97:ALA:H 12 0.11 (1,377) 1:A:96:LYS:HD2 1:A:97:ALA:H 3 0.11 (1,333) 1:A:84:SER:H 1:A:87:VAL:HB 16 0.11 (1,285) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB3 17 0.11 (1,272) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB3 17 0.11	(1,614)	1:A:108:GLU:HG2	1:A:109:ILE:H	10	0.11
(1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 5 0.11 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 13 0.11 (1,473) 1:A:103:ILE:H 1:A:103:ILE:HB 9 0.11 (1,43) 1:A:98:ALA:O 1:A:153:LEU:H 4 0.11 (1,419) 1:A:119:TRP:HE1 1:A:123:ASN:HD21 19 0.11 (1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 18 0.11 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 19 0.11 (1,378) 1:A:96:LYS:HD3 1:A:97:ALA:H 12 0.11 (1,377) 1:A:96:LYS:HD2 1:A:97:ALA:H 3 0.11 (1,333) 1:A:84:SER:H 1:A:87:VAL:HB 16 0.11 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 17 0.11 (1,272) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB3 17 0.11	(1,556)	1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HE3	17	0.11
(1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 13 0.11 (1,473) 1:A:103:ILE:H 1:A:103:ILE:HB 9 0.11 (1,43) 1:A:98:ALA:O 1:A:153:LEU:H 4 0.11 (1,419) 1:A:119:TRP:HE1 1:A:123:ASN:HD21 19 0.11 (1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 18 0.11 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 19 0.11 (1,378) 1:A:96:LYS:HD3 1:A:97:ALA:H 12 0.11 (1,377) 1:A:96:LYS:HD2 1:A:97:ALA:H 3 0.11 (1,333) 1:A:84:SER:H 1:A:87:VAL:HB 16 0.11 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:140:GLU:HA 17 0.11 (1,272) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB3 17 0.11	(1,506)	1:A:25:GLN:HA	1:A:26:THR:HB	18	0.11
(1,473) 1:A:103:ILE:H 1:A:103:ILE:HB 9 0.11 (1,43) 1:A:98:ALA:O 1:A:153:LEU:H 4 0.11 (1,419) 1:A:119:TRP:HE1 1:A:123:ASN:HD21 19 0.11 (1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 18 0.11 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 19 0.11 (1,378) 1:A:96:LYS:HD3 1:A:97:ALA:H 12 0.11 (1,377) 1:A:96:LYS:HD2 1:A:97:ALA:H 3 0.11 (1,333) 1:A:84:SER:H 1:A:87:VAL:HB 16 0.11 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 17 0.11 (1,272) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB3 17 0.11	(1,492)	1:A:81:VAL:HB	1:A:82:GLU:H	5	0.11
(1,43) 1:A:98:ALA:O 1:A:153:LEU:H 4 0.11 (1,419) 1:A:119:TRP:HE1 1:A:123:ASN:HD21 19 0.11 (1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 18 0.11 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 19 0.11 (1,378) 1:A:96:LYS:HD3 1:A:97:ALA:H 12 0.11 (1,377) 1:A:96:LYS:HD2 1:A:97:ALA:H 3 0.11 (1,333) 1:A:84:SER:H 1:A:87:VAL:HB 16 0.11 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 17 0.11 (1,272) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB3 17 0.11	(1,492)	1:A:81:VAL:HB	1:A:82:GLU:H	13	0.11
(1,419) 1:A:119:TRP:HE1 1:A:123:ASN:HD21 19 0.11 (1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 18 0.11 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 19 0.11 (1,378) 1:A:96:LYS:HD3 1:A:97:ALA:H 12 0.11 (1,377) 1:A:96:LYS:HD2 1:A:97:ALA:H 3 0.11 (1,333) 1:A:84:SER:H 1:A:87:VAL:HB 16 0.11 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 17 0.11 (1,272) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB3 17 0.11	(1,473)	1:A:103:ILE:H	1:A:103:ILE:HB	9	0.11
(1,419) 1:A:119:TRP:HE1 1:A:123:ASN:HD21 19 0.11 (1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 18 0.11 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 19 0.11 (1,378) 1:A:96:LYS:HD3 1:A:97:ALA:H 12 0.11 (1,377) 1:A:96:LYS:HD2 1:A:97:ALA:H 3 0.11 (1,333) 1:A:84:SER:H 1:A:87:VAL:HB 16 0.11 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 17 0.11 (1,272) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB3 17 0.11	(1,43)	1:A:98:ALA:O	1:A:153:LEU:H	4	0.11
(1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 18 0.11 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 19 0.11 (1,378) 1:A:96:LYS:HD3 1:A:97:ALA:H 12 0.11 (1,377) 1:A:96:LYS:HD2 1:A:97:ALA:H 3 0.11 (1,333) 1:A:84:SER:H 1:A:87:VAL:HB 16 0.11 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 17 0.11 (1,272) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB3 17 0.11		1:A:119:TRP:HE1	1:A:123:ASN:HD21	19	0.11
(1,378) 1:A:96:LYS:HD3 1:A:97:ALA:H 12 0.11 (1,377) 1:A:96:LYS:HD2 1:A:97:ALA:H 3 0.11 (1,333) 1:A:84:SER:H 1:A:87:VAL:HB 16 0.11 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 17 0.11 (1,272) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB3 17 0.11		1:A:123:ASN:H	1:A:123:ASN:HD22	18	0.11
(1,378) 1:A:96:LYS:HD3 1:A:97:ALA:H 12 0.11 (1,377) 1:A:96:LYS:HD2 1:A:97:ALA:H 3 0.11 (1,333) 1:A:84:SER:H 1:A:87:VAL:HB 16 0.11 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 17 0.11 (1,272) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB3 17 0.11	· · /	1:A:144:PRO:HD2	1:A:145:ASP:H	19	
(1,377) 1:A:96:LYS:HD2 1:A:97:ALA:H 3 0.11 (1,333) 1:A:84:SER:H 1:A:87:VAL:HB 16 0.11 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 17 0.11 (1,272) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB3 17 0.11	· · /	1:A:96:LYS:HD3	1:A:97:ALA:H	12	0.11
(1,333) 1:A:84:SER:H 1:A:87:VAL:HB 16 0.11 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 17 0.11 (1,272) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB3 17 0.11		1:A:96:LYS:HD2	1:A:97:ALA:H	3	0.11
(1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 17 0.11 (1,272) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB3 17 0.11		1:A:84:SER:H	1:A:87:VAL:HB		0.11
(1,272) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB3 17 0.11		1:A:160:GLU:H	1:A:160:GLU:HA	17	0.11
	· · /	1:A:141:GLU:H	1:A:141:GLU:HB3	17	0.11
	(1,266)			5	0.11



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,219)	1:A:6:GLN:H	1:A:6:GLN:HB3	18	0.11
(1,177)	1:A:120:VAL:HB	1:A:121:ASP:H	2	0.11
(1,177)	1:A:120:VAL:HB	1:A:121:ASP:H	20	0.11
(1,123)	1:A:69:PHE:HB2	1:A:70:GLU:H	16	0.11
(1,1208)	1:A:155:LEU:HB2	1:A:156:HIS:H	10	0.11
(1,1181)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:122:ASP:H	5	0.11
(1,1177)	1:A:118:LYS:HA	1:A:121:ASP:HB2	7	0.11
(1,1143)	1:A:82:GLU:HB2	1:A:83:GLY:H	5	0.11
(1,1121)	1:A:52:SER:H	1:A:52:SER:HB2	18	0.11
(1,667)	1:A:39:TYR:HB2	1:A:75:PHE:HE1	20	0.1
(1,63)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:12:LYS:H	18	0.1
(1,621)	1:A:2:ASP:HB2	1:A:3:PHE:HB3	16	0.1
(1,492)	1:A:81:VAL:HB	1:A:82:GLU:H	2	0.1
(1,492)	1:A:81:VAL:HB	1:A:82:GLU:H	3	0.1
(1,492)	1:A:81:VAL:HB	1:A:82:GLU:H	9	0.1
(1,43)	1:A:98:ALA:O	1:A:153:LEU:H	1	0.1
(1,417)	1:A:123:ASN:H	1:A:123:ASN:HD22	17	0.1
(1,387)	1:A:144:PRO:HD3	1:A:145:ASP:H	12	0.1
(1,385)	1:A:144:PRO:HG3	1:A:145:ASP:H	6	0.1
(1,35)	1:A:61:TYR:O	1:A:131:ALA:H	16	0.1
(1,327)	1:A:44:GLN:HA	1:A:47:ALA:H	9	0.1
(1,324)	1:A:27:ALA:H	1:A:30:GLU:HB3	18	0.1
(1,302)	1:A:67:GLY:H	1:A:68:THR:H	11	0.1
(1,286)	1:A:6:GLN:H	1:A:7:PHE:H	3	0.1
(1,285)	1:A:160:GLU:H	1:A:160:GLU:HA	7	0.1
(1,285)	1:A:160:GLU:H	1:A:160:GLU:HA	18	0.1
(1,266)	1:A:125:PHE:H	1:A:125:PHE:HB3	1	0.1
(1,23)	1:A:60:ARG:O	1:A:72:GLU:H	10	0.1
(1,21)	1:A:62:PHE:O	1:A:70:GLU:H	6	0.1
(1,21)	1:A:62:PHE:O	1:A:70:GLU:H	18	0.1
(1,199)	1:A:140:ALA:H	1:A:141:GLU:H	2	0.1
(1,199)	1:A:140:ALA:H	1:A:141:GLU:H	14	0.1
(1,1194)	1:A:141:GLU:HB2	1:A:142:THR:H	16	0.1
(1,1181)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:122:ASP:H	13	0.1
(1,1153)	1:A:96:LYS:HB2	1:A:97:ALA:H	14	0.1
(1,1152)	1:A:96:LYS:H	1:A:96:LYS:HB2	3	0.1
(1,1151)	1:A:94:SER:HB2	1:A:95:GLY:H	15	0.1
(1,1123)	1:A:53:PRO:HB2	1:A:55:GLY:H	4	0.1
(1,1111)	1:A:51:LYS:H	1:A:51:LYS:HB2	19	0.1
(1,1093)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB2	14	0.1
(1,1038)	1:A:13:GLU:HB2	1:A:14:LEU:H	16	0.1
(1,1018)	1:A:9:CYS:HB2	1:A:10:GLU:H	6	0.1



Continued from previous page...

(1,85) 1:A:24:THR:HB 1:A:25:GLN:H 14 0.09 (1,662) 1:A:120:VAL:HA 1:A:125:PHE:HB2 19 0.09 (1,649) 1:A:135:TYR:HE1 1:A:149:THR:HB 16 0.09 (1,556) 1:A:51:LYS:HA 1:A:151:LYS:HE3 15 0.09 (1,500) 1:A:6:GLN:HB3 1:A:7:PHE:H 12 0.09 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 11 0.09 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 11 0.09 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 19 0.09 (1,473) 1:A:103:ILE:H 1:A:103:ILE:HB 11 0.09 (1,474) 1:A:4:GLU:HA 1:A:5:CYS:H 19 0.09 (1,477) 1:A:4:GLU:HA 1:A:153:LEU:H 14 0.09 (1,474) 1:A:19:TRP:HE1 1:A:123:ASN:HD22 8 0.09 (1,410) 1:A:119:TRP:HE1 1:A:123:ASN:HD22 8 0.09 (1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 8 0.09 (1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 4 0.09 (1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 12 0.09 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 7 0.09 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 7 0.09 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:131:ALA:H 2 0.09 (1,331) 1:A:96:LYS:HD3 1:A:97:ALA:H 16 0.09 (1,331) 1:A:96:LYS:HD3 1:A:97:ALA:H 16 0.09 (1,331) 1:A:36:LYR:O 1:A:131:ALA:H 2 0.09 (1,333) 1:A:36:LYR:O 1:A:131:ALA:H 2 0.09 (1,339) 1:A:46:LEU:HA 1:A:129:GLY:H 2 0.09 (1,329) 1:A:46:LEU:HA 1:A:15:LYS:H 12 0.09 (1,329) 1:A:46:LEU:HA 1:A:15:LYS:H 12 0.09 (1,329) 1:A:46:LEU:HA 1:A:160:GLU:HA 8 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 15 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 15 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 19 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 19 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 19 0.09 (1,210) 1:A:63:CR:HB 14 1:A:122:ASP:HB 17 0.09 (1,111) 1:A:122:ASP:HB 11:A:122:ASP:HB 15 0.09 (1,111) 1:A:122:ASP:HB 1:A:122:ASP:HB 15 0.09 (1,111) 1:A:13:AS:SP:HE:HB 1:A:123:ASP:HB 15 0.09 (1,111) 1:A:13:AS:SP:HE:HB 1:A:123:ASP:HB 15 0.09 (1,111) 1:A:13:AS:SP:HE:HB 1:A:123:ASP:HB 15 0.09 (1,111) 1:A:13:AS:SP:HB:HB 1:A:123:ASP:HB 10 0.09 (1,111) 1:A:13:AS:SP:HB:HB 1:A:141:ASP:HBB 15 0.09 (1,111) 1:A:13:AS:SP:HB:HB 1:A:141:ASP:HBB	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,649)	(1,85)	1:A:24:THR:HB	1:A:25:GLN:H	14	0.09
(1,556) 1:A:51:LYS:HA 1:A:51:LYS:HE3 15 0.09 (1,50) 1:A:6:GLN:HB3 1:A:7:PHE:H 12 0.09 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 11 0.09 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 19 0.09 (1,492) 1:A:31:A:103:ILE:H 1:A:103:ILE:HB 11 0.09 (1,473) 1:A:103:ILE:H 1:A:103:ILE:HB 11 0.09 (1,474) 1:A:4:GLU:HA 1:A:5:CYS:H 19 0.09 (1,474) 1:A:4:GLU:HA 1:A:5:CYS:H 19 0.09 (1,431) 1:A:98:ALA:O 1:A:153:LEU:H 14 0.09 (1,442) 1:A:119:TRP:HE1 1:A:123:ASN:HD22 8 0.09 (1,419) 1:A:119:TRP:HE1 1:A:123:ASN:HD22 8 0.09 (1,419) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 8 0.09 (1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 12 0.09 (1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 12 0.09 (1,4386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 7 0.09 (1,378) 1:A:96:LYS:HD3 1:A:97:ALA:H 16 0.09 (1,378) 1:A:96:LYS:HD3 1:A:97:ALA:H 2 0.09 (1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 2 0.09 (1,333) 1:A:44:SER:H 1:A:127:CLU:HB 14 0.09 (1,333) 1:A:44:SER:H 1:A:127:CLU:HB 14 0.09 (1,329) 1:A:46:LEU:HA 1:A:151:LYS:H 12 0.09 (1,318) 1:A:145:GGLU:H 1:A:160:GLU:H 4 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 8 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 15 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 15 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 19 0.09 (1,244) 1:A:63:THR:H 1:A:63:THR:HB 15 0.09 (1,244) 1:A:63:THR:H 1:A:63:THR:HB 15 0.09 (1,219) 1:A:63:CPHE:O 1:A:122:ASP:HB 17 0.09 (1,219) 1:A:63:CPHE:O 1:A:122:ASP:HB 17 0.09 (1,114) 1:A:123:ASP:HB:D 1:A:123:ASP:HB:D 1.A:123:ASP:HB:D 1.A:123:ASP:HB 15 0.09 (1,111) 1:A:133:ASP:HB:D 1:A:123:ASP:HB:D 1.A:123:ASP:HB:D 1.A:123	(1,662)	1:A:120:VAL:HA	1:A:125:PHE:HB2	19	0.09
(1,50)	(1,649)	1:A:135:TYR:HE1	1:A:149:THR:HB	16	0.09
(1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 11 0.09 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 19 0.09 (1,473) 1:A:103:ILE:H 1:A:103:ILE:HB 11 0.09 (1,473) 1:A:4:GLU:HA 1:A:5:CYS:H 19 0.09 (1,474) 1:A:4:GLU:HA 1:A:5:CYS:H 19 0.09 (1,430) 1:A:98:ALA:O 1:A:153:LEU:H 14 0.09 (1,420) 1:A:119:TRP:HE1 1:A:123:ASN:HD22 8 0.09 (1,419) 1:A:119:TRP:HE1 1:A:123:ASN:HD21 8 0.09 (1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 4 0.09 (1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 12 0.09 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 7 0.09 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 7 0.09 (1,378) 1:A:96:LYS:HD3 1:A:97:ALA:H 16 0.09 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 2 0.09 (1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 2 0.09 (1,333) 1:A:84:SER:H 1:A:87:VAL:HB 14 0.09 (1,329) 1:A:46:LEU:HA 1:A:130:GLU:H 4 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:130:GLU:HA 8 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 15 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 19 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 19 0.09 (1,241) 1:A:62:PHE:O 1:A:130:GLU:H 19 0.09 (1,291) 1:A:60:ARG:O 1:A:72:GLU:H 19 0.09 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:122:ASP:H 17 0.09 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:122:ASP:H 17 0.09 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:122:ASP:H 17 0.09 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:GLN:H 19 0.09 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 17 0.09 (1,1119) 1:A:60:ARG:H 1:A:122:ASP:HB2 5 0.09 (1,1119) 1:A:60:ARG:H 1:A:122:ASP:HB2 5 0.09 (1,1119) 1:A:60:ARG:H 1:A:121:ASP:HB2 1 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG11 10 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:8	(1,556)	1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HE3	15	0.09
(1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 19 0.09 (1,473) 1:A:103:ILE:H 1:A:103:ILE:HB 11 0.09 (1,47) 1:A:4:GLU:HA 1:A:5:CYS:H 19 0.09 (1,420) 1:A:119:TRP:HE1 1:A:123:ASN:HD22 8 0.09 (1,419) 1:A:119:TRP:HE1 1:A:123:ASN:HD21 8 0.09 (1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD21 8 0.09 (1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 4 0.09 (1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 12 0.09 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 7 0.09 (1,378) 1:A:96:LYS:HD3 1:A:97:ALA:H 16 0.09 (1,378) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 2 0.09 (1,331) 1:A:4127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 2 0.09 (1,333) 1:A:46:LEU:HA 1:A:51:LYS:H 12 0.09 (1,338) 1:A:46:LEU:HA 1:A:130:GLU:H 4	(1,50)	1:A:6:GLN:HB3	1:A:7:PHE:H	12	0.09
(1,473) 1:A:103:ILE:H 1:A:103:ILE:HB 11 0.09 (1,47) 1:A:4:GLU:HA 1:A:5:CYS:H 19 0.09 (1,43) 1:A:98:ALA:O 1:A:15:EU:H 14 0.09 (1,420) 1:A:119:TRP:HEI 1:A:123:ASN:HD22 8 0.09 (1,419) 1:A:119:TRP:HEI 1:A:123:ASN:HD22 4 0.09 (1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 4 0.09 (1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 12 0.09 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 7 0.09 (1,378) 1:A:96:IVS:HD3 1:A:97:ALA:H 16 0.09 (1,378) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 2 0.09 (1,341) 1:A:127:EU:HB2 1:A:129:GLY:H 2 0.09 (1,333) 1:A:84:SER:H 1:A:129:GLY:H 2 0.09 (1,333) 1:A:46:LEU:HA 1:A:51:LYS:H 12 0.09 (1,338) 1:A:127:CEU:HA 1:A:130:GLU:H 4	(1,492)	1:A:81:VAL:HB	1:A:82:GLU:H	11	0.09
(1,47) 1:A:4:GLU:HA 1:A:5:CYS:H 19 0.09 (1,43) 1:A:98:ALA:O 1:A:153:LEU:H 14 0.09 (1,420) 1:A:119:TRP:HE1 1:A:123:ASN:HD22 8 0.09 (1,419) 1:A:119:TRP:HE1 1:A:123:ASN:HD21 8 0.09 (1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD21 8 0.09 (1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 12 0.09 (1,347) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 12 0.09 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 7 0.09 (1,388) 1:A:96:DYS:HD3 1:A:97:ALA:H 16 0.09 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 2 0.09 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 2 0.09 (1,333) 1:A:84:SER:H 1:A:87:VAL:HB 14 0.09 (1,329) 1:A:46:LEU:HA 1:A:51:LYS:H 12 0.09 (1,388) 1:A:129:GLY:H 1:A:130:GLU:H 4 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 8 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 15 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 15 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 19 0.09 (1,261) 1:A:122:ASP:H 1:A:122:ASP:HB2 7 0.09 (1,244) 1:A:68:THR:H 1:A:68:THR:HB 15 0.09 (1,219) 1:A:60:ARG:O 1:A:72:GLU:H 12 0.09 (1,184) 1:A:60:GLU:H 1:A:160:GLU:H 19 0.09 (1,219) 1:A:60:ARG:O 1:A:72:GLU:H 19 0.09 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 17 0.09 (1,119) 1:A:60:ARG:O 1:A:72:GLU:H 19 0.09 (1,119) 1:A:60:ARG:H 1:A:126:ASP:H 17 0.09 (1,119) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 18 0.09 (1,1119) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 18 0.09 (1,1119) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:121:ASP:HB2 1 0.09 (1,1119) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:121:ASP:HB2 1 0.09 (1,1119) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 18 0.09 (1,1119) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 18 0.09 (1,1119) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 18 0.09 (1,1119) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 10 0.09 (1,1119) 1:A:138:LYS:HB2 1:A:141:GLU:HG2 10 0.09 (1,1119) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:48:VAL:HG11 10 0.09 (1,1119) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 2 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47	(1,492)	1:A:81:VAL:HB	1:A:82:GLU:H	19	0.09
(1,43)	(1,473)	1:A:103:ILE:H	1:A:103:ILE:HB	11	0.09
(1,420)	(1,47)	1:A:4:GLU:HA	1:A:5:CYS:H	19	0.09
(1,419) 1:A:119:TRP:HE1 1:A:123:ASN:HD21 8 0.09 (1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 4 0.09 (1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 12 0.09 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 7 0.09 (1,378) 1:A:96:LYS:HD3 1:A:97:ALA:H 16 0.09 (1,378) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 2 0.09 (1,335) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 2 0.09 (1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 2 0.09 (1,333) 1:A:46:EEU:HB2 1:A:51:LYS:H 12 0.09 (1,339) 1:A:46:LEU:HA 1:A:130:GLU:H 4 0.09 (1,318) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 8 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 15 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 19 0.09 (1,261) 1:A:122:ASP:H 1:A:122:ASP:HB2 7<	(1,43)	1:A:98:ALA:O	1:A:153:LEU:H	14	0.09
(1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 4 0.09 (1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 12 0.09 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 7 0.09 (1,378) 1:A:96:LYS:HD3 1:A:97:ALA:H 16 0.09 (1,335) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 2 0.09 (1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 2 0.09 (1,333) 1:A:46:EU:HA 1:A:87:VAL:HB 14 0.09 (1,329) 1:A:46:EU:HA 1:A:51:LYS:H 12 0.09 (1,318) 1:A:129:GLY:H 1:A:130:GLU:H 4 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 8 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 15 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:122:ASP:HB2 7 0.09 (1,285) 1:A:160:GARG:H 1:A:66:GLN:HB3 7 0.09 (1,244) 1:A:66:ARG:O 1:A:72:GLU:H 12	(1,420)	1:A:119:TRP:HE1	1:A:123:ASN:HD22	8	0.09
(1,417) 1:A:123:ASN:H 1:A:123:ASN:HD22 12 0.09 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 7 0.09 (1,378) 1:A:96:LYS:HD3 1:A:97:ALA:H 16 0.09 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 2 0.09 (1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 2 0.09 (1,333) 1:A:84:SER:H 1:A:87:VAL:HB 14 0.09 (1,329) 1:A:46:LEU:HA 1:A:51:LYS:H 12 0.09 (1,318) 1:A:129:GLY:H 1:A:130:GLU:H 4 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 8 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 19 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:122:ASP:HB2 7 0.09 (1,261) 1:A:122:ASP:H 1:A:66:GLN:H 1:A:66:THR:HB 15 0.09 (1,244) 1:A:66:GLN:H 1:A:66:GLN:HB 1 0.09 (1,219) 1:A:66:GLN:H 1:A:70:GLU:H <td>(1,419)</td> <td>1:A:119:TRP:HE1</td> <td>1:A:123:ASN:HD21</td> <td>8</td> <td>0.09</td>	(1,419)	1:A:119:TRP:HE1	1:A:123:ASN:HD21	8	0.09
(1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 7 0.09 (1,378) 1:A:96:LYS:HD3 1:A:97:ALA:H 16 0.09 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 2 0.09 (1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 2 0.09 (1,333) 1:A:84:SER:H 1:A:87:VAL:HB 14 0.09 (1,329) 1:A:46:LEU:HA 1:A:51:LYS:H 12 0.09 (1,318) 1:A:129:GLY:H 1:A:130:GLU:H 4 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 8 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 19 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:122:ASP:HB2 7 0.09 (1,261) 1:A:122:ASP:H 1:A:122:ASP:HB2 7 0.09 (1,244) 1:A:66:THR:H 1:A:68:THR:HB 15 0.09 (1,219) 1:A:6:GCLN:H 1:A:70:GLU:H 19 0.09 (1,219) 1:A:6:GCRN:H 1:A:12:GCSP:H 19 <	(1,417)	1:A:123:ASN:H	1:A:123:ASN:HD22	4	0.09
(1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 7 0.09 (1,378) 1:A:96:LYS:HD3 1:A:97:ALA:H 16 0.09 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 2 0.09 (1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 2 0.09 (1,333) 1:A:84:SER:H 1:A:87:VAL:HB 14 0.09 (1,329) 1:A:46:LEU:HA 1:A:51:LYS:H 12 0.09 (1,318) 1:A:129:GLY:H 1:A:130:GLU:H 4 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 8 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 19 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 19 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 19 0.09 (1,261) 1:A:122:ASP:H 1:A:160:GLU:HA 19 0.09 (1,244) 1:A:66:TRR:H 1:A:68:THR:HB 15 0.09 (1,23) 1:A:60:ARG:O 1:A:72:GLU:H 19	(1,417)	1:A:123:ASN:H	1:A:123:ASN:HD22	12	0.09
(1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 2 0.09 (1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 2 0.09 (1,333) 1:A:84:SER:H 1:A:87:VAL:HB 14 0.09 (1,329) 1:A:46:LEU:HA 1:A:51:LYS:H 12 0.09 (1,318) 1:A:129:GLY:H 1:A:130:GLU:H 4 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 8 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 19 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 19 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:122:ASP:HB2 7 0.09 (1,261) 1:A:3:160:GLU:H 1:A:122:ASP:HB2 7 0.09 (1,261) 1:A:66:STHR:H 1:A:68:THR:HB 15 0.09 (1,23) 1:A:60:ARG:O 1:A:72:GLU:H 12 0.09 (1,219) 1:A:6:GLN:H 1:A:126:ASP:H 17 0.09 (1,211) 1:A:6:GCARG:H 1:A:72:GLU:H 19 <	(1,386)	1:A:144:PRO:HD2	1:A:145:ASP:H	7	0.09
(1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 2 0.09 (1,333) 1:A:84:SER:H 1:A:87:VAL:HB 14 0.09 (1,329) 1:A:46:LEU:HA 1:A:51:LYS:H 12 0.09 (1,318) 1:A:129:GLY:H 1:A:130:GLU:H 4 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 8 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 15 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 19 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 19 0.09 (1,261) 1:A:122:ASP:H 1:A:122:ASP:HB2 7 0.09 (1,261) 1:A:68:THR:H 1:A:68:THR:HB 15 0.09 (1,244) 1:A:68:THR:H 1:A:68:THR:HB 15 0.09 (1,219) 1:A:6:GLN:H 1:A:6:GLN:HB3 7 0.09 (1,219) 1:A:6:GPHE:O 1:A:70:GLU:H 19 0.09 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 17	(1,378)	1:A:96:LYS:HD3	1:A:97:ALA:H	16	0.09
(1,333) 1:A:84:SER:H 1:A:87:VAL:HB 14 0.09 (1,329) 1:A:46:LEU:HA 1:A:51:LYS:H 12 0.09 (1,318) 1:A:129:GLY:H 1:A:130:GLU:H 4 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 8 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 19 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 19 0.09 (1,261) 1:A:122:ASP:H 1:A:160:GLU:HA 19 0.09 (1,261) 1:A:160:GLU:H 19 0.09 0.09 (1,261) 1:A:160:GLU:H 19 0.09 0.09 (1,261) 1:A:160:GLU:H 1:A:122:ASP:HB2 7 0.09 (1,261) 1:A:68:THR:H 1:A:68:THR:HB 15 0.09 (1,214) 1:A:66:ARG:O 1:A:72:GLU:H 12 0.09 (1,219) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 19 0.09 (1,144) 1:A:612:FHB2 1:A:126:ASP:H 17 0.09 <	(1,35)	1:A:61:TYR:O	1:A:131:ALA:H	2	0.09
(1,333) 1:A:84:SER:H 1:A:87:VAL:HB 14 0.09 (1,329) 1:A:46:LEU:HA 1:A:51:LYS:H 12 0.09 (1,318) 1:A:129:GLY:H 1:A:130:GLU:H 4 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 8 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 19 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 19 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 19 0.09 (1,261) 1:A:160:GLU:H 19 0.09 (1,261) 1:A:160:GLU:H 19 0.09 (1,261) 1:A:160:GLU:H 19 0.09 (1,261) 1:A:60:ARG:H 1:A:72:GLU:H 12 0.09 (1,210) 1:A:60:ARG:O 1:A:70:GLU:H 19 0.09 (1,219) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 19 0.09 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 17 0.09 (1,170) 1:A:60:ARG:H 1:A:72:GLU:O 14 0.09 <td>(1,341)</td> <td>1:A:127:LEU:HB2</td> <td>1:A:129:GLY:H</td> <td>2</td> <td>0.09</td>	(1,341)	1:A:127:LEU:HB2	1:A:129:GLY:H	2	0.09
(1,318) 1:A:129:GLY:H 1:A:130:GLU:H 4 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 8 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 15 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 19 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:19 0.09 (1,261) 1:A:122:ASP:H 1:A:160:GLU:HA 19 0.09 (1,261) 1:A:122:ASP:H 1:A:122:ASP:HB2 7 0.09 (1,261) 1:A:166:THR:H 1:A:68:THR:HB 15 0.09 (1,244) 1:A:68:THR:H 1:A:68:THR:HB 15 0.09 (1,23) 1:A:60:ARG:O 1:A:72:GLU:H 12 0.09 (1,219) 1:A:6:GLN:H 1:A:126:ASP:H 17 0.09 (1,211) 1:A:60:ARG:H 1:A:126:ASP:H 17 0.09 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 17 0.09 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 5 0.09	(1,333)	1:A:84:SER:H	1:A:87:VAL:HB	14	0.09
(1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 8 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 15 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 19 0.09 (1,261) 1:A:122:ASP:H 1:A:122:ASP:HB2 7 0.09 (1,244) 1:A:68:THR:H 1:A:68:THR:HB 15 0.09 (1,23) 1:A:60:ARG:O 1:A:72:GLU:H 12 0.09 (1,219) 1:A:6:GLN:H 1:A:6:GLN:HB3 7 0.09 (1,211) 1:A:6:2PHE:O 1:A:70:GLU:H 19 0.09 (1,211) 1:A:6:2PHE:O 1:A:70:GLU:H 19 0.09 (1,184) 1:A:6:2PHE:O 1:A:72:GLU:O 14 0.09 (1,17) 1:A:60:ARG:H 1:A:72:GLU:O 14 0.09 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 5 0.09 (1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 18 0.09 (1,1179) 1:A:118:LYS:HG2 1:A:121:ASP:HB2 5 <t< td=""><td>(1,329)</td><td>1:A:46:LEU:HA</td><td>1:A:51:LYS:H</td><td>12</td><td>0.09</td></t<>	(1,329)	1:A:46:LEU:HA	1:A:51:LYS:H	12	0.09
(1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 15 0.09 (1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 19 0.09 (1,261) 1:A:122:ASP:H 1:A:122:ASP:HB2 7 0.09 (1,244) 1:A:68:THR:H 1:A:68:THR:HB 15 0.09 (1,23) 1:A:60:ARG:O 1:A:72:GLU:H 12 0.09 (1,219) 1:A:60:ARG:O 1:A:70:GLU:H 19 0.09 (1,21) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 19 0.09 (1,121) 1:A:62:PHE:O 1:A:72:GLU:H 19 0.09 (1,17) 1:A:60:ARG:H 1:A:72:GLU:O 14 0.09 (1,17) 1:A:60:ARG:H 1:A:72:GLU:O 14 0.09 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 5 0.09 (1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 18 0.09 (1,1181) 1:A:118:LYS:HB2 1:A:121:ASP:HB2 5 0.09 (1,1179) 1:A:116:LEU:HA 1:A:19:TRP:HB2 1 <	(1,318)	1:A:129:GLY:H	1:A:130:GLU:H	4	0.09
(1,285) 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:HA 19 0.09 (1,261) 1:A:122:ASP:H 1:A:122:ASP:HB2 7 0.09 (1,244) 1:A:68:THR:H 1:A:68:THR:HB 15 0.09 (1,23) 1:A:60:ARG:O 1:A:72:GLU:H 12 0.09 (1,219) 1:A:6:GLN:H 1:A:6:GLN:HB3 7 0.09 (1,21) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 19 0.09 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 17 0.09 (1,17) 1:A:60:ARG:H 1:A:72:GLU:O 14 0.09 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 5 0.09 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:141:GLU:HG2 18 0.09 (1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 18 0.09 (1,1181) 1:A:118:LYS:HB2 1:A:121:ASP:HB2 5 0.09 (1,1175) 1:A:116:LEU:HA 1:A:119:TRP:HB2 1 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG11 10 <td>(1,285)</td> <td>1:A:160:GLU:H</td> <td>1:A:160:GLU:HA</td> <td>8</td> <td>0.09</td>	(1,285)	1:A:160:GLU:H	1:A:160:GLU:HA	8	0.09
(1,261) 1:A:122:ASP:H 1:A:122:ASP:HB2 7 0.09 (1,244) 1:A:68:THR:H 1:A:68:THR:HB 15 0.09 (1,23) 1:A:60:ARG:O 1:A:72:GLU:H 12 0.09 (1,219) 1:A:6:GLN:H 1:A:6:GLN:HB3 7 0.09 (1,21) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 19 0.09 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 17 0.09 (1,17) 1:A:60:ARG:H 1:A:72:GLU:O 14 0.09 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 5 0.09 (1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 18 0.09 (1,1181) 1:A:121:ASP:HB2 1:A:122:ASP:H 4 0.09 (1,1179) 1:A:116:LEU:HA 1:A:121:ASP:HB2 5 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG11 10 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG13 10 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 2	(1,285)	1:A:160:GLU:H	1:A:160:GLU:HA	15	0.09
(1,244) 1:A:68:THR:H 1:A:68:THR:HB 15 0.09 (1,23) 1:A:60:ARG:O 1:A:72:GLU:H 12 0.09 (1,219) 1:A:6:GLN:H 1:A:6:GLN:HB3 7 0.09 (1,21) 1:A:60:ARG:H 1:A:70:GLU:H 19 0.09 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 17 0.09 (1,17) 1:A:60:ARG:H 1:A:72:GLU:O 14 0.09 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 5 0.09 (1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 18 0.09 (1,1191) 1:A:138:ASP:HB2 1:A:122:ASP:H 4 0.09 (1,1179) 1:A:118:LYS:HG2 1:A:121:ASP:HB2 5 0.09 (1,1175) 1:A:116:LEU:HA 1:A:19:TRP:HB2 1 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG11 10 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG13 10 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 2 <td>(1,285)</td> <td>1:A:160:GLU:H</td> <td>1:A:160:GLU:HA</td> <td>19</td> <td>0.09</td>	(1,285)	1:A:160:GLU:H	1:A:160:GLU:HA	19	0.09
(1,23) 1:A:60:ARG:O 1:A:72:GLU:H 12 0.09 (1,219) 1:A:6:GLN:H 1:A:6:GLN:HB3 7 0.09 (1,21) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 19 0.09 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 17 0.09 (1,17) 1:A:60:ARG:H 1:A:72:GLU:O 14 0.09 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 5 0.09 (1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 18 0.09 (1,1181) 1:A:121:ASP:HB2 1:A:122:ASP:H 4 0.09 (1,1179) 1:A:118:LYS:HG2 1:A:121:ASP:HB2 5 0.09 (1,1175) 1:A:116:LEU:HA 1:A:19:TRP:HB2 1 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG11 10 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG13 10 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 2 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 12 </td <td>(1,261)</td> <td>1:A:122:ASP:H</td> <td>1:A:122:ASP:HB2</td> <td>7</td> <td>0.09</td>	(1,261)	1:A:122:ASP:H	1:A:122:ASP:HB2	7	0.09
(1,219) 1:A:6:GLN:H 1:A:6:GLN:HB3 7 0.09 (1,21) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 19 0.09 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 17 0.09 (1,17) 1:A:60:ARG:H 1:A:72:GLU:O 14 0.09 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 5 0.09 (1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 18 0.09 (1,1191) 1:A:138:ASP:HB2 1:A:122:ASP:H 4 0.09 (1,1179) 1:A:118:LYS:HG2 1:A:121:ASP:HB2 5 0.09 (1,1175) 1:A:116:LEU:HA 1:A:119:TRP:HB2 1 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG11 10 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG13 10 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 2 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 12 0.09	(1,244)	1:A:68:THR:H	1:A:68:THR:HB	15	0.09
(1,219) 1:A:6:GLN:H 1:A:6:GLN:HB3 7 0.09 (1,21) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 19 0.09 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 17 0.09 (1,17) 1:A:60:ARG:H 1:A:72:GLU:O 14 0.09 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 5 0.09 (1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 18 0.09 (1,1191) 1:A:138:ASP:HB2 1:A:122:ASP:H 4 0.09 (1,1179) 1:A:118:LYS:HG2 1:A:121:ASP:HB2 5 0.09 (1,1175) 1:A:116:LEU:HA 1:A:119:TRP:HB2 1 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG11 10 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG13 10 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 2 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 12 0.09	(1,23)	1:A:60:ARG:O	1:A:72:GLU:H	12	0.09
(1,21) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 19 0.09 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 17 0.09 (1,17) 1:A:60:ARG:H 1:A:72:GLU:O 14 0.09 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 5 0.09 (1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 18 0.09 (1,1181) 1:A:121:ASP:HB2 1:A:122:ASP:H 4 0.09 (1,1179) 1:A:118:LYS:HG2 1:A:121:ASP:HB2 5 0.09 (1,1175) 1:A:116:LEU:HA 1:A:119:TRP:HB2 1 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG11 10 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG12 10 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 2 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 12 0.09	` ′	1:A:6:GLN:H	1:A:6:GLN:HB3	7	0.09
(1,17) 1:A:60:ARG:H 1:A:72:GLU:O 14 0.09 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 5 0.09 (1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 18 0.09 (1,1181) 1:A:121:ASP:HB2 1:A:122:ASP:H 4 0.09 (1,1179) 1:A:118:LYS:HG2 1:A:121:ASP:HB2 5 0.09 (1,1175) 1:A:116:LEU:HA 1:A:119:TRP:HB2 1 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG11 10 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG12 10 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 2 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 12 0.09		1:A:62:PHE:O	1:A:70:GLU:H	19	0.09
(1,17) 1:A:60:ARG:H 1:A:72:GLU:O 14 0.09 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 5 0.09 (1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 18 0.09 (1,1181) 1:A:121:ASP:HB2 1:A:122:ASP:H 4 0.09 (1,1179) 1:A:118:LYS:HG2 1:A:121:ASP:HB2 5 0.09 (1,1175) 1:A:116:LEU:HA 1:A:119:TRP:HB2 1 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG11 10 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG12 10 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 2 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 12 0.09	(1,184)	1:A:125:PHE:HB2	1:A:126:ASP:H	17	0.09
(1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 5 0.09 (1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 18 0.09 (1,1181) 1:A:121:ASP:HB2 1:A:122:ASP:H 4 0.09 (1,1179) 1:A:118:LYS:HG2 1:A:121:ASP:HB2 5 0.09 (1,1175) 1:A:116:LEU:HA 1:A:119:TRP:HB2 1 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG11 10 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG12 10 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG13 10 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 2 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 12 0.09		1:A:60:ARG:H	1:A:72:GLU:O	14	0.09
(1,1191) 1:A:138:ASN:HB2 1:A:141:GLU:HG2 18 0.09 (1,1181) 1:A:121:ASP:HB2 1:A:122:ASP:H 4 0.09 (1,1179) 1:A:118:LYS:HG2 1:A:121:ASP:HB2 5 0.09 (1,1175) 1:A:116:LEU:HA 1:A:119:TRP:HB2 1 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG11 10 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG12 10 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG13 10 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 2 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 12 0.09	· · /	1:A:89:THR:HB	1:A:90:GLY:H	5	0.09
(1,1181) 1:A:121:ASP:HB2 1:A:122:ASP:H 4 0.09 (1,1179) 1:A:118:LYS:HG2 1:A:121:ASP:HB2 5 0.09 (1,1175) 1:A:116:LEU:HA 1:A:119:TRP:HB2 1 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG11 10 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG12 10 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG13 10 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 2 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 12 0.09	. ,	1:A:138:ASN:HB2	1:A:141:GLU:HG2	18	0.09
(1,1179) 1:A:118:LYS:HG2 1:A:121:ASP:HB2 5 0.09 (1,1175) 1:A:116:LEU:HA 1:A:119:TRP:HB2 1 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG11 10 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG12 10 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG13 10 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 2 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 12 0.09	· · /	1:A:121:ASP:HB2		4	
(1,1175) 1:A:116:LEU:HA 1:A:119:TRP:HB2 1 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG11 10 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG12 10 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG13 10 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 2 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 12 0.09		1:A:118:LYS:HG2			
(1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG11 10 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG12 10 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG13 10 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 2 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 12 0.09	· · /	1:A:116:LEU:HA	1:A:119:TRP:HB2		
(1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG12 10 0.09 (1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG13 10 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 2 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 12 0.09	· · /				
(1,1119) 1:A:51:LYS:HE2 1:A:81:VAL:HG13 10 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 2 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 12 0.09	· · /				
(1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 2 0.09 (1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 12 0.09	· · /				
(1,105) 1:A:46:LEU:HB2 1:A:47:ALA:H 12 0.09	· · /				
	,				
(1,00) 1,11,4T, 11110,11D 1,11,40,QDIV,II	(1,85)	1:A:24:THR:HB	1:A:25:GLN:H	7	0.08



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,7)	1:A:24:THR:H	1:A:71:VAL:O	11	0.08
(1,666)	1:A:131:ALA:HA	1:A:153:LEU:HB2	3	0.08
(1,665)	1:A:131:ALA:HA	1:A:153:LEU:HB3	6	0.08
(1,665)	1:A:131:ALA:HA	1:A:153:LEU:HB3	16	0.08
(1,664)	1:A:134:ILE:HB	1:A:149:THR:HA	9	0.08
(1,63)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:12:LYS:H	1	0.08
(1,621)	1:A:2:ASP:HB2	1:A:3:PHE:HB3	7	0.08
(1,556)	1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HE3	10	0.08
(1,556)	1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HE3	13	0.08
(1,553)	1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HE2	1	0.08
(1,517)	1:A:28:MET:HA	1:A:30:GLU:H	15	0.08
(1,493)	1:A:82:GLU:HB2	1:A:83:GLY:H	19	0.08
(1,492)	1:A:81:VAL:HB	1:A:82:GLU:H	18	0.08
(1,492)	1:A:81:VAL:HB	1:A:82:GLU:H	20	0.08
(1,48)	1:A:6:GLN:HA	1:A:7:PHE:H	14	0.08
(1,48)	1:A:6:GLN:HA	1:A:7:PHE:H	16	0.08
(1,470)	1:A:31:LEU:H	1:A:31:LEU:HB2	15	0.08
(1,465)	1:A:7:PHE:H	1:A:7:PHE:HB3	16	0.08
(1,43)	1:A:98:ALA:O	1:A:153:LEU:H	5	0.08
(1,43)	1:A:98:ALA:O	1:A:153:LEU:H	13	0.08
(1,420)	1:A:119:TRP:HE1	1:A:123:ASN:HD22	1	0.08
(1,420)	1:A:119:TRP:HE1	1:A:123:ASN:HD22	14	0.08
(1,420)	1:A:119:TRP:HE1	1:A:123:ASN:HD22	19	0.08
(1,386)	1:A:144:PRO:HD2	1:A:145:ASP:H	5	0.08
(1,371)	1:A:51:LYS:HD2	1:A:52:SER:H	3	0.08
(1,371)	1:A:51:LYS:HD2	1:A:52:SER:H	6	0.08
(1,352)	1:A:104:GLY:H	1:A:147:LEU:H	2	0.08
(1,341)	1:A:127:LEU:HB2	1:A:129:GLY:H	3	0.08
(1,341)	1:A:127:LEU:HB2	1:A:129:GLY:H	4	0.08
(1,341)	1:A:127:LEU:HB2	1:A:129:GLY:H	17	0.08
(1,333)	1:A:84:SER:H	1:A:87:VAL:HB	8	0.08
(1,333)	1:A:84:SER:H	1:A:87:VAL:HB	15	0.08
(1,302)	1:A:67:GLY:H	1:A:68:THR:H	2	0.08
(1,286)	1:A:6:GLN:H	1:A:7:PHE:H	9	0.08
(1,285)	1:A:160:GLU:H	1:A:160:GLU:HA	16	0.08
(1,25)	1:A:20:LEU:O	1:A:75:PHE:H	10	0.08
(1,216)	1:A:159:LEU:H	1:A:160:GLU:H	9	0.08
(1,213)	1:A:155:LEU:HB2	1:A:156:HIS:H	3	0.08
(1,21)	1:A:62:PHE:O	1:A:70:GLU:H	13	0.08
(1,199)	1:A:140:ALA:H	1:A:141:GLU:H	10	0.08
(1,199)	1:A:140:ALA:H	1:A:141:GLU:H	12	0.08
(1,143)	1:A:89:THR:HB	1:A:90:GLY:H	17	0.08



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,138)	1:A:84:SER:HA	1:A:85:GLY:H	13	0.08
(1,1194)	1:A:141:GLU:HB2	1:A:142:THR:H	17	0.08
(1,1181)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:122:ASP:H	10	0.08
(1,1181)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:122:ASP:H	16	0.08
(1,1153)	1:A:96:LYS:HB2	1:A:97:ALA:H	4	0.08
(1,1151)	1:A:94:SER:HB2	1:A:95:GLY:H	3	0.08
(1,1133)	1:A:61:TYR:HA	1:A:70:GLU:HG2	5	0.08
(1,1132)	1:A:60:ARG:HA	1:A:133:GLU:HG2	6	0.08
(1,1088)	1:A:34:LEU:HB2	1:A:35:PHE:H	10	0.08
(1,1050)	1:A:17:VAL:HB	1:A:76:PRO:HB2	16	0.08
(1,1018)	1:A:9:CYS:HB2	1:A:10:GLU:H	17	0.08
(1,1013)	1:A:6:GLN:HB2	1:A:7:PHE:H	2	0.08
(1,7)	1:A:24:THR:H	1:A:71:VAL:O	9	0.07
(1,666)	1:A:131:ALA:HA	1:A:153:LEU:HB2	12	0.07
(1,664)	1:A:134:ILE:HB	1:A:149:THR:HA	3	0.07
(1,663)	1:A:120:VAL:HA	1:A:125:PHE:HB3	5	0.07
(1,663)	1:A:120:VAL:HA	1:A:125:PHE:HB3	14	0.07
(1,662)	1:A:120:VAL:HA	1:A:125:PHE:HB2	6	0.07
(1,657)	1:A:45:LEU:HB3	1:A:84:SER:HB3	8	0.07
(1,633)	1:A:102:TYR:HA	1:A:149:THR:HB	2	0.07
(1,63)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:12:LYS:H	8	0.07
(1,572)	1:A:96:LYS:HA	1:A:96:LYS:HE3	5	0.07
(1,556)	1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HE3	14	0.07
(1,506)	1:A:25:GLN:HA	1:A:26:THR:HB	7	0.07
(1,492)	1:A:81:VAL:HB	1:A:82:GLU:H	1	0.07
(1,43)	1:A:98:ALA:O	1:A:153:LEU:H	18	0.07
(1,43)	1:A:98:ALA:O	1:A:153:LEU:H	19	0.07
(1,41)	1:A:57:PRO:O	1:A:135:TYR:H	15	0.07
(1,386)	1:A:144:PRO:HD2	1:A:145:ASP:H	10	0.07
(1,385)	1:A:144:PRO:HG3	1:A:145:ASP:H	7	0.07
(1,355)	1:A:140:ALA:H	1:A:142:THR:H	8	0.07
(1,343)	1:A:97:ALA:HA	1:A:155:LEU:H	17	0.07
(1,341)	1:A:127:LEU:HB2	1:A:129:GLY:H	12	0.07
(1,341)	1:A:127:LEU:HB2	1:A:129:GLY:H	20	0.07
(1,333)	1:A:84:SER:H	1:A:87:VAL:HB	19	0.07
(1,329)	1:A:46:LEU:HA	1:A:51:LYS:H	13	0.07
(1,328)	1:A:47:ALA:HA	1:A:51:LYS:H	10	0.07
(1,327)	1:A:44:GLN:HA	1:A:47:ALA:H	4	0.07
(1,320)	1:A:145:ASP:H	1:A:146:GLN:H	20	0.07
(1,292)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:LEU:H	18	0.07
(1,286)	1:A:6:GLN:H	1:A:7:PHE:H	4	0.07
(1,285)	1:A:160:GLU:H	1:A:160:GLU:HA	1	0.07



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

(1,285) (1,285) (1,285) (1,21) (1,21) (1,202)	1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:H 1:A:160:GLU:H 1:A:62:PHE:O 1:A:62:PHE:O	1:A:160:GLU:HA 1:A:160:GLU:HA 1:A:160:GLU:HA 1:A:70:GLU:H	5 9 11	0.07 0.07
(1,285) (1,21) (1,21)	1:A:160:GLU:H 1:A:62:PHE:O	1:A:160:GLU:HA		0.07
(1,21) (1,21)	1:A:62:PHE:O		11	
(1,21)		1:A:70:GLU:H	11	0.07
. , ,	1:A:62:PHE:O	1.111.101.012.0111	1	0.07
(1,202)		1:A:70:GLU:H	10	0.07
	1:A:142:THR:HA	1:A:143:ALA:H	6	0.07
(1,202)	1:A:142:THR:HA	1:A:143:ALA:H	8	0.07
(1,201)	1:A:141:GLU:HB3	1:A:142:THR:H	16	0.07
(1,199)	1:A:140:ALA:H	1:A:141:GLU:H	11	0.07
(1,198)	1:A:139:PRO:HB3	1:A:140:ALA:H	11	0.07
(1,184)	1:A:125:PHE:HB2	1:A:126:ASP:H	2	0.07
(1,13)	1:A:58:PHE:H	1:A:74:GLY:O	20	0.07
(1,1194)	1:A:141:GLU:HB2	1:A:142:THR:H	1	0.07
(1,1181)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:122:ASP:H	18	0.07
(1,1181)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:122:ASP:H	20	0.07
(1,1173)	1:A:114:ASP:HB2	1:A:115:ALA:H	18	0.07
(1,1135)	1:A:64:MET:HG2	1:A:154:MET:H	4	0.07
(1,1121)	1:A:52:SER:H	1:A:52:SER:HB2	12	0.07
(1,1121)	1:A:52:SER:H	1:A:52:SER:HB2	19	0.07
(1,110)	1:A:51:LYS:HB2	1:A:52:SER:H	9	0.07
(1,1097)	1:A:45:LEU:HB3	1:A:84:SER:HB2	15	0.07
(1,1038)	1:A:13:GLU:HB2	1:A:14:LEU:H	6	0.07
(1,1031)	1:A:12:LYS:HB2	1:A:13:GLU:H	3	0.07
(1,1027)	1:A:12:LYS:H	1:A:12:LYS:HB2	16	0.07
(1,1019)	1:A:9:CYS:HB2	1:A:100:SER:HA	12	0.07
(1,9)	1:A:26:THR:H	1:A:69:PHE:O	9	0.06
(1,666)	1:A:131:ALA:HA	1:A:153:LEU:HB2	10	0.06
(1,63)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:12:LYS:H	9	0.06
(1,596)	1:A:13:GLU:HG3	1:A:14:LEU:H	15	0.06
(1,556)	1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HE3	18	0.06
(1,553)	1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HE2	11	0.06
(1,492)	1:A:81:VAL:HB	1:A:82:GLU:H	4	0.06
(1,492)	1:A:81:VAL:HB	1:A:82:GLU:H	10	0.06
(1,492)	1:A:81:VAL:HB	1:A:82:GLU:H	12	0.06
(1,492)	1:A:81:VAL:HB	1:A:82:GLU:H	15	0.06
(1,492)	1:A:81:VAL:HB	1:A:82:GLU:H	17	0.06
(1,43)	1:A:98:ALA:O	1:A:153:LEU:H	17	0.06
(1,417)	1:A:123:ASN:H	1:A:123:ASN:HD22	10	0.06
(1,387)	1:A:144:PRO:HD3	1:A:145:ASP:H	6	0.06
(1,385)	1:A:144:PRO:HG3	1:A:145:ASP:H	16	0.06
(1,378)	1:A:96:LYS:HD3	1:A:97:ALA:H	9	0.06
(1,374)	1:A:53:PRO:HG3	1:A:54:SER:H	11	0.06



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

(1,371) 1:A:51:IVS:HD2 1:A:52:SER:H 8 0.06 (1,371) 1:A:51:IVS:HD2 1:A:52:SER:H 16 0.06 (1,355) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 17 0.06 (1,343) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 19 0.06 (1,343) 1:A:97:ALA:HA 1:A:129:GLY:H 10 0.06 (1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 1 0.06 (1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 15 0.06 (1,341) 1:A:427:LEU:HB2 1:A:429:GLY:H 15 0.06 (1,331) 1:A:48:SER:H 1:A:88:VAL:HB3 9 0.06 (1,277) 1:A:31:LEU:H 1:A:64:MET:HB3 11 0.06 (1,243) 1:A:64:MET:H 1:A:64:MET:HB3 11 0.06 (1,217) 1:A:66:GLU:HA 1:A:161:HIS:H 17 0.06 (1,217) 1:A:60:PHE:O 1:A:70:GLU:H 2 0.06 (1,211) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 3 <	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 17 0.06 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 19 0.06 (1,343) 1:A:97:ALA:HA 1:A:155:LEU:H 10 0.06 (1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 1 0.06 (1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 15 0.06 (1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 15 0.06 (1,333) 1:A:84:SER:H 1:A:87:VAL:HB 9 0.06 (1,27) 1:A:21:LEU:O 1:A:88:VAL:H 13 0.06 (1,243) 1:A:64:MET:H 1:A:64:MET:HB3 11 0.06 (1,229) 1:A:31:LEU:H 1:A:31:LEU:HB3 9 0.06 (1,217) 1:A:160:GLU:HA 1:A:161:HIS:H 17 0.06 (1,217) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 2 0.06 (1,217) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 2 0.06 (1,211) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 8 0.06 (1,201) 1:A:141:GLU:HB3 1:A:142:THR:H 13 0.06 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 6 0.06 (1,184) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 12 0.06 (1,133) 1:A:58:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 19 0.06 (1,133) 1:A:58:PHE:H 1:A:74:GLY:O 7 0.06 (1,133) 1:A:58:PHE:H 1:A:74:GLY:O 7 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 4 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 4 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 5 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 4 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 5 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 11 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 1 0.06 (1,1173) 1:A:14:GLU:H 1:A:141:GLU:HB2 9 0.06 (1,1173) 1:A:14:ASP:HB2 1:A:15:ALA:H 4 0.06 (1,1173) 1:A:141:ASP:HB2 1:A:15:ALA:H 4 0.06 (1,1173) 1:A:14:ASP:HB2 1:A:15:ALA:H 4 0.06 (1,11	(1,371)	1:A:51:LYS:HD2	1:A:52:SER:H	8	0.06
(1,343) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 19 0.06 (1,343) 1:A:97:ALA:HA 1:A:125:LEU:H 10 0.06 (1,344) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 1 0.06 (1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 15 0.06 (1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 15 0.06 (1,341) 1:A:48:SER:H 1:A:87:VAL:HB 9 0.06 (1,27) 1:A:21:LEU:O 1:A:88:VAL:H 13 0.06 (1,27) 1:A:21:LEU:O 1:A:88:VAL:H 13 0.06 (1,243) 1:A:64:MET:H 1:A:64:MET:HB3 11 0.06 (1,229) 1:A:31:LEU:H 1:A:31:LEU:HB3 9 0.06 (1,217) 1:A:160:GLU:HA 1:A:161:HIS:H 17 0.06 (1,217) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 2 0.06 (1,211) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 8 0.06 (1,211) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 8 0.06 (1,201) 1:A:141:GLU:HB3 1:A:126:ASP:H 13 0.06 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 19 0.06 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 19 0.06 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 12 0.06 (1,135) 1:A:82:GLU:H 1:A:83:GLY:H 6 0.06 (1,135) 1:A:82:GLU:H 1:A:83:GLY:H 6 0.06 (1,133) 1:A:58:PHE:H 1:A:74:GLY:O 7 0.06 (1,133) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 4 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 5 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 10 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 11 0.06 (1,113) 1:A:144:ASP:HB2 1:A:15:ALA:H 14 0.06 (1,1173) 1:A:144:SP:HB2 1:A:70:GLU:H 11 0.06 (1,1173) 1:A:144:SP:HB2 1:A:70:GLU:H 11 0.06 (1,1173) 1:A:144:ASP:HB2 1:A:70:GLU:H 11 0.06 (1,1173) 1:A:144:ASP:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,1173) 1:A:144:ASP:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,1173) 1:A:144:ASP:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,1173) 1:A:144:ASP:HB2 1:A:15:ALA:H 15 0.06 (1,1173) 1:A:144:ASP:HB2 1:A:15:ALA:H 16 0.06 (1,1173) 1:A:144:ASP:HB2 1:A:15:ALA:H 17 0.06 (1,1173) 1:A:144:ASP:HB2 1:A:15:ALA:H 17 0.06 (1,1173) 1:A:144:ASP:HB2 1:A:15:ALB:H 17 0.06 (1,1173) 1:A:144:ASP	(1,371)	1:A:51:LYS:HD2	1:A:52:SER:H	16	0.06
(1,343) 1:A:97:ALA:HA 1:A:155:LEU:H 10 0.06 (1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 1 0.06 (1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 15 0.06 (1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 15 0.06 (1,333) 1:A:84:SER:H 1:A:87:VAL:HB 9 0.06 (1,27) 1:A:21:LEU:O 1:A:88:VAL:H 13 0.06 (1,27) 1:A:21:LEU:O 1:A:88:VAL:H 13 0.06 (1,243) 1:A:64:MET:H 1:A:64:MET:HB3 11 0.06 (1,229) 1:A:31:LEU:H 1:A:31:LEU:HB3 9 0.06 (1,217) 1:A:160:GLU:HA 1:A:161:HIS:H 17 0.06 (1,211) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 2 0.06 (1,211) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 8 0.06 (1,201) 1:A:141:GLU:HB3 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 6 0.06 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 19 0.06 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 12 0.06 (1,135) 1:A:82:GLU:H 1:A:83:GLY:H 6 0.06 (1,131) 1:A:58:PHE:H 1:A:74:GLY:O 7 0.06 (1,131) 1:A:58:PHE:HB 1:A:74:GLY:O 12 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 4 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 11 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 11 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 11 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,113) 1:A:14:ASP:HB 1:A:14:ASP:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,113) 1:A:14:ASP:HB2 1:A:70:GLU:H 11 0.06 (1,113) 1:A:14:ASP:HB2 1:A:15:ALA:H 13 0.06 (1,1173) 1:A:14:ASP:HB2 1:A:15:ALA:H 15 0.06 (1,1173) 1:A:14:ASP:HB2 1:A:15:ALA:H 15 0.06 (1,1173) 1:A:14:ASP:HB2 1:A:15:ALA:H 15 0.06 (1,1173) 1:A:14:ASP:HB2 1:A:15:ALA:H 17 0.06 (1,1174) 1:A:14:ASP:HB2 1:A:15:ALA:H 17 0.06 (1,1174) 1:A:14:ASP:HB2 1:A:15:ASB:HB2 17 0.06 (1,1174) 1:A:14:ASP:HB2 1:A:15:ASB:HB2 17 0.06 (1,1174) 1:A:15:ASB:HB1 1:A:25:GLN:H 17 0.06 (1,1174) 1:A:15:ASB:HB1 1:A:25:GLN:	(1,35)	1:A:61:TYR:O	1:A:131:ALA:H	17	0.06
(1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 1 0.06 (1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 15 0.06 (1,333) 1:A:84:SER:H 1:A:87:VAL:HB 9 0.06 (1,27) 1:A:21:LEU:O 1:A:88:VAL:H 13 0.06 (1,243) 1:A:64:MET:H 1:A:64:MET:HB3 11 0.06 (1,229) 1:A:31:LEU:H 1:A:31:LEU:HB3 9 0.06 (1,217) 1:A:60:GLU:HA 1:A:161:HIS:H 17 0.06 (1,211) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 2 0.06 (1,201) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 2 0.06 (1,121) 1:A:62:PHE:HB3 1:A:126:ASP:H 13 0.06 (1,211) 1:A:62:PHE:HB3 1:A:126:ASP:H 13 0.06 (1,212) 1:A:62:PHE:HB3 1:A:126:ASP:H 13 0.06 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 19 0.06 (1,184) 1:A:13:ES:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 19	(1,35)	1:A:61:TYR:O	1:A:131:ALA:H	19	0.06
(1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 15 0.06 (1,333) 1:A:84:SER:H 1:A:87:VAL:HB 9 0.06 (1,27) 1:A:21:LEU:O 1:A:88:VAL:H 13 0.06 (1,243) 1:A:64:MET:H 1:A:64:MET:HB3 11 0.06 (1,229) 1:A:31:LEU:H 1:A:31:LEU:HB3 9 0.06 (1,217) 1:A:160:GLU:HA 1:A:161:HIS:H 17 0.06 (1,217) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 2 0.06 (1,21) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 8 0.06 (1,21) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 8 0.06 (1,201) 1:A:141:GLU:HB3 1:A:142:THR:H 13 0.06 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 6 0.06 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 19 0.06 (1,131) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 12 0.06 (1,133) 1:A:58:PHE:H 1:A:74:GLY:O 7 0.06 (1,133) 1:A:58:PHE:H 1:A:74:GLY:O 7 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 4 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 4 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 11 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 4 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 4 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 11 0.06 (1,120) 1:A:145:ASP:H 1:A:145:ASP:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,120) 1:A:145:ASP:H 1:A:145:ASP:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,120) 1:A:145:ASP:H 1:A:145:ASP:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,1133) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB2 9 0.06 (1,1133) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB2 1-A:70:GLU:H 13 0.06 (1,1103) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB2 1-A:70:GLU:H 13 0.06 (1,1103) 1:A:141:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 4 0.06 (1,1103) 1:A:145:ASP:HB 1:A:145:ASP:HB2 1-A:115:ALA:H 13 0.06 (1,1113) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 17 0.06 (1,1113) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 17 0.06 (1,1113) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 17 0.06 (1,1113) 1:A:144:ASP:HB2 1:A:13:TYR:HE1 10 0.06 (1,1113) 1:A:144:ASP:HB2 1:A:13:TYR:HE1 10 0.06 (1,1103) 1:A:40:HIS:H 1:A:40:HIS:HB2 13 0.06 (1,1103) 1:A:40:HIS:H 1:A:40:HIS:HB2 13 0.06 (1,108) 1:A:42:THR:HB 1:A:25:GLN:H 19 0.05 ((1,343)	1:A:97:ALA:HA	1:A:155:LEU:H	10	0.06
(1,333) 1:A:84:SER:H 1:A:87:VAL:HB 9 0.06 (1,27) 1:A:21:LEU:O 1:A:88:VAL:H 13 0.06 (1,243) 1:A:64:MET:H 1:A:64:MET:HB3 11 0.06 (1,243) 1:A:64:MET:H 1:A:64:MET:HB3 11 0.06 (1,217) 1:A:31:LEU:H 1:A:31:LEU:HB3 9 0.06 (1,217) 1:A:460:GLU:HA 1:A:161:HIS:H 17 0.06 (1,211) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 2 0.06 (1,211) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 8 0.06 (1,201) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 8 0.06 (1,201) 1:A:41:GLU:HB3 1:A:412:CASP:H 13 0.06 (1,211) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 8 0.06 (1,184) 1:A:141:GLU:HB3 1:A:126:ASP:H 19 0.06 (1,184) 1:A:142:SPHE:HB2 1:A:126:ASP:H 19 0.06 (1,133) 1:A:89:THR:HB 1:A:29:GSGLY:H 12 0	(1,341)	1:A:127:LEU:HB2	1:A:129:GLY:H	1	0.06
(1,27) 1:A:21:LEU:O 1:A:88:VAL:H 13 0.06 (1,243) 1:A:64:MET:H 1:A:64:MET:HB3 11 0.06 (1,229) 1:A:31:LEU:H 1:A:64:MET:HB3 9 0.06 (1,217) 1:A:160:GLU:HA 1:A:161:HIS:H 17 0.06 (1,211) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 8 0.06 (1,211) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 8 0.06 (1,201) 1:A:142:GLU:HB3 1:A:142:THR:H 13 0.06 (1,201) 1:A:141:GLU:HB3 1:A:142:CASP:H 6 0.06 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 6 0.06 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:29:GLY:H 12 0.06 (1,135) 1:A:89:THE:HB1 1:A:30:GLY:H 6 0.06 (1,133) 1:A:58:PHE:H 1:A:74:GLY:O 7 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 4 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 1 0.0	(1,341)	1:A:127:LEU:HB2	1:A:129:GLY:H	15	0.06
(1,243) 1:A:64:MET:H 1:A:64:MET:HB3 11 0.06 (1,229) 1:A:31:LEU:H 1:A:31:LEU:HB3 9 0.06 (1,217) 1:A:160:GLU:HA 1:A:161:HIS:H 17 0.06 (1,211) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 2 0.06 (1,201) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 8 0.06 (1,201) 1:A:41:GLU:HB3 1:A:142:THR:H 13 0.06 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 6 0.06 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 19 0.06 (1,184) 1:A:42:SPHE:HB2 1:A:126:ASP:H 19 0.06 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:29:GLY:H 12 0.06 (1,135) 1:A:82:GLU:H 1:A:83:GLY:H 6 0.06 (1,133) 1:A:58:PHE:H 1:A:74:GLY:O 7 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 4 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 1 0	(1,333)	1:A:84:SER:H	1:A:87:VAL:HB	9	0.06
(1,229) 1:A:31:LEU:H 1:A:31:LEU:HB3 9 0.06 (1,217) 1:A:160:GLU:HA 1:A:161:HIS:H 17 0.06 (1,21) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 2 0.06 (1,21) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 8 0.06 (1,201) 1:A:141:GLU:HB3 1:A:142:THR:H 13 0.06 (1,201) 1:A:141:GLU:HB3 1:A:126:ASP:H 6 0.06 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 19 0.06 (1,144) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 19 0.06 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 12 0.06 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 6 0.06 (1,135) 1:A:82:GLU:H 1:A:83:GLY:H 6 0.06 (1,131) 1:A:58:PHE:H 1:A:74:GLY:O 7 0.06 (1,132) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 4 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 5 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 11 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 11 0.06 (1,123) 1:A:146:GLN:H 1:A:146:GLN:HB2 16 0.06 (1,1100) 1:A:145:ASP:H 1:A:145:ASP:HB2 2 0.06 (1,1100) 1:A:145:ASP:H 1:A:145:ASP:HB2 2 0.06 (1,1100) 1:A:145:ASP:H 1:A:145:ASP:HB2 2 0.06 (1,1100) 1:A:145:ASP:HB2 1:A:15:ALA:H 4 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 13 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:15:ALA:H 16 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 17 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 17 0.06 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 6 0.06 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 6 0.06 (1,1100) 1:A:40:HIS:H 1:A:40:HIS:HB2 13 0.06	(1,27)	1:A:21:LEU:O	1:A:88:VAL:H	13	0.06
(1,217) 1:A:160:GLU:HA 1:A:161:HIS:H 17 0.06 (1,21) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 2 0.06 (1,21) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 8 0.06 (1,201) 1:A:141:GLU:HB3 1:A:125:GLU:H 8 0.06 (1,201) 1:A:141:GLU:HB3 1:A:125:ASP:H 19 0.06 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 19 0.06 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 19 0.06 (1,143) 1:A:89:THE:HB2 1:A:126:ASP:H 19 0.06 (1,143) 1:A:89:THE:HB2 1:A:39:GLY:H 12 0.06 (1,135) 1:A:82:GLU:H 1:A:83:GLY:H 6 0.06 (1,131) 1:A:58:PHE:H 1:A:74:GLY:O 7 0.06 (1,131) 1:A:69:PHE:HB1 1:A:70:GLU:H 4 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 5 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 10 <th< td=""><td>(1,243)</td><td>1:A:64:MET:H</td><td>1:A:64:MET:HB3</td><td>11</td><td>0.06</td></th<>	(1,243)	1:A:64:MET:H	1:A:64:MET:HB3	11	0.06
(1,21) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 2 0.06 (1,21) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 8 0.06 (1,201) 1:A:141:GLU:HB3 1:A:142:THR:H 13 0.06 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 6 0.06 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 19 0.06 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 12 0.06 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 12 0.06 (1,135) 1:A:82:GLU:H 1:A:83:GLY:H 6 0.06 (1,13) 1:A:58:PHE:H 1:A:74:GLY:O 7 0.06 (1,13) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 4 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 5 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 1 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 1 0.06 (1,1201) 1:A:144:GSP:HB2 1:A:146:GLN:H 1 0.06 <td>(1,229)</td> <td>1:A:31:LEU:H</td> <td>1:A:31:LEU:HB3</td> <td>9</td> <td>0.06</td>	(1,229)	1:A:31:LEU:H	1:A:31:LEU:HB3	9	0.06
(1,21) 1:A:62:PHE:O 1:A:70:GLU:H 8 0.06 (1,201) 1:A:141:GLU:HB3 1:A:142:THR:H 13 0.06 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 6 0.06 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 19 0.06 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 12 0.06 (1,135) 1:A:82:GLU:H 1:A:83:GLY:H 6 0.06 (1,13) 1:A:58:PHE:H 1:A:74:GLY:O 7 0.06 (1,13) 1:A:58:PHE:H 1:A:70:GLU:H 4 0.06 (1,133) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 4 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 5 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 11 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,1201) 1:A:145:GGN:HB2 1:A:145:ASP:HB2 1 0.06 (1,1201) 1:A:145:GEN:H 1:A:145:ASP:HB2 2 <th< td=""><td>(1,217)</td><td>1:A:160:GLU:HA</td><td>1:A:161:HIS:H</td><td>17</td><td>0.06</td></th<>	(1,217)	1:A:160:GLU:HA	1:A:161:HIS:H	17	0.06
(1,201) 1:A:141:GLU:HB3 1:A:142:THR:H 13 0.06 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 6 0.06 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 19 0.06 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 12 0.06 (1,135) 1:A:82:GLU:H 1:A:83:GLY:H 6 0.06 (1,13) 1:A:58:PHE:H 1:A:74:GLY:O 7 0.06 (1,13) 1:A:58:PHE:H 1:A:70:GLU:H 4 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 4 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 5 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 11 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,1201) 1:A:14:6:GLN:H 1:A:14:5ASP:HB2 16 0.06 (1,1201) 1:A:14:5ASP:HB 1:A:145:ASP:HB2 2	(1,21)	1:A:62:PHE:O	1:A:70:GLU:H	2	0.06
(1,201) 1:A:141:GLU:HB3 1:A:142:THR:H 13 0.06 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 6 0.06 (1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 19 0.06 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 12 0.06 (1,135) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 6 0.06 (1,13) 1:A:58:PHE:H 1:A:74:GLY:O 7 0.06 (1,13) 1:A:58:PHE:H 1:A:70:GLU:H 4 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 4 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 5 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,1201) 1:A:145:GGLN:H 1:A:145:GSLN:HB2 16 0.06 (1,1201) 1:A:145:SASP:H 1:A:145:ASP:HB2 2 0.06 (1,1173) 1:A:141:GLU:H 1:A:145:ASP:HB2 9	, ,	1:A:62:PHE:O	1:A:70:GLU:H	8	0.06
(1,184) 1:A:125:PHE:HB2 1:A:126:ASP:H 19 0.06 (1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 12 0.06 (1,135) 1:A:82:GLU:H 1:A:83:GLY:H 6 0.06 (1,13) 1:A:58:PHE:H 1:A:74:GLY:O 7 0.06 (1,13) 1:A:58:PHE:H 1:A:70:GLU:H 4 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 5 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 1 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 1 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 1 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,1201) 1:A:146:GLN:H 1:A:145:GSP:HB2 16 0.06 (1,1201) 1:A:145:ASP:HB 1:A:145:ASP:HB2 2 0.06 (1,1173) 1:A:141:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 4 <t< td=""><td>(1,201)</td><td>1:A:141:GLU:HB3</td><td>1:A:142:THR:H</td><td>13</td><td>0.06</td></t<>	(1,201)	1:A:141:GLU:HB3	1:A:142:THR:H	13	0.06
(1,143) 1:A:89:THR:HB 1:A:90:GLY:H 12 0.06 (1,135) 1:A:82:GLU:H 1:A:83:GLY:H 6 0.06 (1,13) 1:A:58:PHE:H 1:A:74:GLY:O 7 0.06 (1,13) 1:A:58:PHE:H 1:A:74:GLY:O 12 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 4 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 5 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 11 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,1201) 1:A:146:GLN:H 1:A:146:GLN:HB2 16 0.06 (1,1201) 1:A:145:ASP:H 1:A:145:ASP:HB2 2 0.06 (1,1193) 1:A:141:GLU:H 1:A:145:ASP:HB2 2 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 4 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 16	(1,184)	1:A:125:PHE:HB2	1:A:126:ASP:H	6	0.06
(1,135) 1:A:82:GLU:H 1:A:83:GLY:H 6 0.06 (1,13) 1:A:58:PHE:H 1:A:74:GLY:O 7 0.06 (1,13) 1:A:58:PHE:H 1:A:74:GLY:O 12 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 4 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 5 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 11 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,1201) 1:A:146:GLN:H 1:A:146:GLN:HB2 16 0.06 (1,1201) 1:A:145:ASP:HB2 1:A:145:ASP:HB2 2 0.06 (1,1200) 1:A:145:ASP:HB2 2 0.06 (1,1173) 1:A:141:GLU:H 1:A:115:ALA:H 4 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 4 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 16 0.06 (1,1173) 1:A:109:ILE:HG12 1:A:113:TYR:HE1 20 0.06 <	(1,184)	1:A:125:PHE:HB2	1:A:126:ASP:H	19	0.06
(1,13) 1:A:58:PHE:H 1:A:74:GLY:O 7 0.06 (1,13) 1:A:58:PHE:H 1:A:74:GLY:O 12 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 4 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 5 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 11 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,1201) 1:A:146:GLN:HB2 1:A:146:GLN:HB2 16 0.06 (1,1200) 1:A:145:ASP:HB 1:A:145:ASP:HB2 2 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 4 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 13 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 16 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 16	(1,143)	1:A:89:THR:HB	1:A:90:GLY:H	12	0.06
(1,13) 1:A:58:PHE:H 1:A:74:GLY:O 12 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 4 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 5 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 11 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,1201) 1:A:146:GLN:H 1:A:146:GLN:HB2 16 0.06 (1,1200) 1:A:145:ASP:H 1:A:145:ASP:HB2 2 0.06 (1,1173) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB2 9 0.06 (1,1173) 1:A:141:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 4 0.06 (1,1173) 1:A:14:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 13 0.06 (1,1173) 1:A:14:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 16 0.06 (1,1173) 1:A:14:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 16 0.06 (1,1173) 1:A:14:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 16 0.06 (1,1173) 1:A:61:TYR:HA 1:A:71:VAL:HA <th< td=""><td>(1,135)</td><td>1:A:82:GLU:H</td><td>1:A:83:GLY:H</td><td>6</td><td>0.06</td></th<>	(1,135)	1:A:82:GLU:H	1:A:83:GLY:H	6	0.06
(1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 4 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 5 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 11 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,1201) 1:A:146:GLN:H 1:A:146:GLN:HB2 16 0.06 (1,1200) 1:A:145:ASP:H 1:A:145:ASP:HB2 2 0.06 (1,1193) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB2 9 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 4 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 13 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 16 0.06 (1,1173) 1:A:109:ILE:HG12 1:A:113:TYR:HE1 20 0.06 (1,1183) 1:A:70:GLU:HG2 1:A:71:VAL:HA 15 0.06 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:54:SER:H 7 0.06 (1,1121) 1:A:53:PRO:HB2 1:A:54:SER:HB2	(1,13)	1:A:58:PHE:H	1:A:74:GLY:O	7	0.06
(1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 5 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 11 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,1201) 1:A:146:GLN:H 1:A:146:GLN:HB2 16 0.06 (1,1200) 1:A:145:ASP:H 1:A:145:ASP:HB2 2 0.06 (1,1193) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB2 9 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 4 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 13 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 16 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 16 0.06 (1,1173) 1:A:109:ILE:HG12 1:A:115:ALA:H 16 0.06 (1,1183) 1:A:70:GLU:HG2 1:A:71:VAL:HA 15 0.06 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:54:SER:H 7 0.06 (1,1121) 1:A:53:PRO:HB2 1:A:54:SER:HB2	(1,13)	1:A:58:PHE:H	1:A:74:GLY:O	12	0.06
(1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 11 0.06 (1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,1201) 1:A:146:GLN:H 1:A:146:GLN:HB2 16 0.06 (1,1200) 1:A:145:ASP:H 1:A:145:ASP:HB2 2 0.06 (1,1193) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB2 9 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 4 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 13 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 16 0.06 (1,1173) 1:A:109:ILE:HG12 1:A:115:ALA:H 16 0.06 (1,1165) 1:A:109:ILE:HG12 1:A:113:TYR:HE1 20 0.06 (1,1138) 1:A:70:GLU:HG2 1:A:71:VAL:HA 15 0.06 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 6 0.06 (1,1121) 1:A:53:PRO:HB2 1:A:54:SER:H 7 0.06 (1,1093) 1:A:40:HIS:H 1:A:40:HIS:HB2<	(1,123)	1:A:69:PHE:HB2	1:A:70:GLU:H	4	0.06
(1,123) 1:A:69:PHE:HB2 1:A:70:GLU:H 13 0.06 (1,1201) 1:A:146:GLN:H 1:A:146:GLN:HB2 16 0.06 (1,1200) 1:A:145:ASP:H 1:A:145:ASP:HB2 2 0.06 (1,1193) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB2 9 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 4 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 13 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 16 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 16 0.06 (1,1173) 1:A:109:ILE:HG12 1:A:113:TYR:HE1 20 0.06 (1,1165) 1:A:109:ILE:HG12 1:A:113:TYR:HE1 20 0.06 (1,1138) 1:A:61:TYR:HA 1:A:71:VAL:HA 15 0.06 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:54:SER:H 7 0.06 (1,1121) 1:A:53:PRO:HB2 1:A:54:SER:HB2 17 0.06 (1,108) 1:A:40:HIS:H 1:A:40:HIS:	(1,123)	1:A:69:PHE:HB2	1:A:70:GLU:H	5	0.06
(1,1201) 1:A:146:GLN:H 1:A:146:GLN:HB2 16 0.06 (1,1200) 1:A:145:ASP:H 1:A:145:ASP:HB2 2 0.06 (1,1193) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB2 9 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 4 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 13 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 16 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 16 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 16 0.06 (1,1173) 1:A:109:ILE:HG12 1:A:113:TYR:HE1 20 0.06 (1,1165) 1:A:109:ILE:HG12 1:A:71:VAL:HA 15 0.06 (1,1138) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 6 0.06 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:54:SER:H 7 0.06 (1,1121) 1:A:53:PRO:HB2 1:A:54:SER:HB2 17 0.06 (1,108) 1:A:40:HIS:H 1:A:40:HIS	(1,123)	1:A:69:PHE:HB2	1:A:70:GLU:H	11	0.06
(1,1200) 1:A:145:ASP:H 1:A:145:ASP:HB2 2 0.06 (1,1193) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB2 9 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 4 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 13 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 16 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 16 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:113:TYR:HE1 20 0.06 (1,1165) 1:A:109:ILE:HG12 1:A:113:TYR:HE1 20 0.06 (1,1138) 1:A:70:GLU:HG2 1:A:71:VAL:HA 15 0.06 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 6 0.06 (1,1120) 1:A:53:PRO:HB2 1:A:54:SER:H 7 0.06 (1,1121) 1:A:52:SER:H 1:A:40:HIS:HB2 13 0.06 (1,108) 1:A:48:GLY:H 1:A:49:GLN:H 17 0.06 (1,85) 1:A:24:THR:HB 1:A:25:GLN:H <td>(1,123)</td> <td>1:A:69:PHE:HB2</td> <td>1:A:70:GLU:H</td> <td>13</td> <td>0.06</td>	(1,123)	1:A:69:PHE:HB2	1:A:70:GLU:H	13	0.06
(1,1193) 1:A:141:GLU:H 1:A:141:GLU:HB2 9 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 4 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 13 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 16 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:113:TYR:HE1 20 0.06 (1,1165) 1:A:109:ILE:HG12 1:A:113:TYR:HE1 20 0.06 (1,1138) 1:A:70:GLU:HG2 1:A:71:VAL:HA 15 0.06 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 6 0.06 (1,1122) 1:A:53:PRO:HB2 1:A:54:SER:H 7 0.06 (1,1121) 1:A:52:SER:H 1:A:40:HIS:HB2 13 0.06 (1,1093) 1:A:40:HIS:H 1:A:49:GLN:H 17 0.06 (1,85) 1:A:24:THR:HB 1:A:25:GLN:H 12 0.05 (1,85) 1:A:131:ALA:HA 1:A:153:LEU:HB3 7 0.05	(1,1201)	1:A:146:GLN:H	1:A:146:GLN:HB2	16	0.06
(1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 4 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 13 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 16 0.06 (1,1173) 1:A:109:ILE:HG12 1:A:113:TYR:HE1 20 0.06 (1,1165) 1:A:109:ILE:HG12 1:A:113:TYR:HE1 20 0.06 (1,1138) 1:A:70:GLU:HG2 1:A:71:VAL:HA 15 0.06 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 6 0.06 (1,1122) 1:A:53:PRO:HB2 1:A:54:SER:H 7 0.06 (1,1121) 1:A:52:SER:H 1:A:52:SER:HB2 17 0.06 (1,1093) 1:A:40:HIS:H 1:A:40:HIS:HB2 13 0.06 (1,108) 1:A:48:GLY:H 1:A:49:GLN:H 17 0.06 (1,85) 1:A:24:THR:HB 1:A:25:GLN:H 19 0.05 (1,665) 1:A:131:ALA:HA 1:A:153:LEU:HB3 7 0.05	(1,1200)	1:A:145:ASP:H	1:A:145:ASP:HB2	2	0.06
(1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 13 0.06 (1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 16 0.06 (1,1165) 1:A:109:ILE:HG12 1:A:113:TYR:HE1 20 0.06 (1,1138) 1:A:70:GLU:HG2 1:A:71:VAL:HA 15 0.06 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 6 0.06 (1,1122) 1:A:53:PRO:HB2 1:A:54:SER:H 7 0.06 (1,1121) 1:A:52:SER:H 1:A:52:SER:HB2 17 0.06 (1,1093) 1:A:40:HIS:H 1:A:40:HIS:HB2 13 0.06 (1,108) 1:A:48:GLY:H 1:A:49:GLN:H 17 0.06 (1,85) 1:A:24:THR:HB 1:A:25:GLN:H 12 0.05 (1,85) 1:A:24:THR:HB 1:A:25:GLN:H 19 0.05 (1,665) 1:A:131:ALA:HA 1:A:153:LEU:HB3 7 0.05	(1,1193)	1:A:141:GLU:H	1:A:141:GLU:HB2	9	0.06
(1,1173) 1:A:114:ASP:HB2 1:A:115:ALA:H 16 0.06 (1,1165) 1:A:109:ILE:HG12 1:A:113:TYR:HE1 20 0.06 (1,1138) 1:A:70:GLU:HG2 1:A:71:VAL:HA 15 0.06 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 6 0.06 (1,1122) 1:A:53:PRO:HB2 1:A:54:SER:H 7 0.06 (1,1121) 1:A:52:SER:H 1:A:52:SER:HB2 17 0.06 (1,1093) 1:A:40:HIS:H 1:A:40:HIS:HB2 13 0.06 (1,108) 1:A:48:GLY:H 1:A:49:GLN:H 17 0.06 (1,85) 1:A:24:THR:HB 1:A:25:GLN:H 12 0.05 (1,85) 1:A:24:THR:HB 1:A:25:GLN:H 19 0.05 (1,665) 1:A:131:ALA:HA 1:A:153:LEU:HB3 7 0.05	(1,1173)	1:A:114:ASP:HB2	1:A:115:ALA:H	4	0.06
(1,1165) 1:A:109:ILE:HG12 1:A:113:TYR:HE1 20 0.06 (1,1138) 1:A:70:GLU:HG2 1:A:71:VAL:HA 15 0.06 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 6 0.06 (1,1122) 1:A:53:PRO:HB2 1:A:54:SER:H 7 0.06 (1,1121) 1:A:52:SER:H 1:A:52:SER:HB2 17 0.06 (1,1093) 1:A:40:HIS:H 1:A:40:HIS:HB2 13 0.06 (1,108) 1:A:48:GLY:H 1:A:49:GLN:H 17 0.06 (1,85) 1:A:24:THR:HB 1:A:25:GLN:H 12 0.05 (1,85) 1:A:24:THR:HB 1:A:25:GLN:H 19 0.05 (1,665) 1:A:131:ALA:HA 1:A:153:LEU:HB3 7 0.05	(1,1173)	1:A:114:ASP:HB2	1:A:115:ALA:H	13	0.06
(1,1138) 1:A:70:GLU:HG2 1:A:71:VAL:HA 15 0.06 (1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 6 0.06 (1,1122) 1:A:53:PRO:HB2 1:A:54:SER:H 7 0.06 (1,1121) 1:A:52:SER:H 1:A:52:SER:HB2 17 0.06 (1,1093) 1:A:40:HIS:H 1:A:40:HIS:HB2 13 0.06 (1,108) 1:A:48:GLY:H 1:A:49:GLN:H 17 0.06 (1,85) 1:A:24:THR:HB 1:A:25:GLN:H 12 0.05 (1,85) 1:A:24:THR:HB 1:A:25:GLN:H 19 0.05 (1,665) 1:A:131:ALA:HA 1:A:153:LEU:HB3 7 0.05	(1,1173)	1:A:114:ASP:HB2	1:A:115:ALA:H	16	0.06
(1,1133) 1:A:61:TYR:HA 1:A:70:GLU:HG2 6 0.06 (1,1122) 1:A:53:PRO:HB2 1:A:54:SER:H 7 0.06 (1,1121) 1:A:52:SER:H 1:A:52:SER:HB2 17 0.06 (1,1093) 1:A:40:HIS:H 1:A:40:HIS:HB2 13 0.06 (1,108) 1:A:48:GLY:H 1:A:49:GLN:H 17 0.06 (1,85) 1:A:24:THR:HB 1:A:25:GLN:H 12 0.05 (1,85) 1:A:24:THR:HB 1:A:25:GLN:H 19 0.05 (1,665) 1:A:131:ALA:HA 1:A:153:LEU:HB3 7 0.05	(1,1165)	1:A:109:ILE:HG12	1:A:113:TYR:HE1	20	0.06
(1,1122) 1:A:53:PRO:HB2 1:A:54:SER:H 7 0.06 (1,1121) 1:A:52:SER:H 1:A:52:SER:HB2 17 0.06 (1,1093) 1:A:40:HIS:H 1:A:40:HIS:HB2 13 0.06 (1,108) 1:A:48:GLY:H 1:A:49:GLN:H 17 0.06 (1,85) 1:A:24:THR:HB 1:A:25:GLN:H 12 0.05 (1,85) 1:A:24:THR:HB 1:A:25:GLN:H 19 0.05 (1,665) 1:A:131:ALA:HA 1:A:153:LEU:HB3 7 0.05	(1,1138)	1:A:70:GLU:HG2	1:A:71:VAL:HA	15	0.06
(1,1122) 1:A:53:PRO:HB2 1:A:54:SER:H 7 0.06 (1,1121) 1:A:52:SER:H 1:A:52:SER:HB2 17 0.06 (1,1093) 1:A:40:HIS:H 1:A:40:HIS:HB2 13 0.06 (1,108) 1:A:48:GLY:H 1:A:49:GLN:H 17 0.06 (1,85) 1:A:24:THR:HB 1:A:25:GLN:H 12 0.05 (1,85) 1:A:24:THR:HB 1:A:25:GLN:H 19 0.05 (1,665) 1:A:131:ALA:HA 1:A:153:LEU:HB3 7 0.05	(1,1133)	1:A:61:TYR:HA	1:A:70:GLU:HG2	6	0.06
(1,1093) 1:A:40:HIS:H 1:A:40:HIS:HB2 13 0.06 (1,108) 1:A:48:GLY:H 1:A:49:GLN:H 17 0.06 (1,85) 1:A:24:THR:HB 1:A:25:GLN:H 12 0.05 (1,85) 1:A:24:THR:HB 1:A:25:GLN:H 19 0.05 (1,665) 1:A:131:ALA:HA 1:A:153:LEU:HB3 7 0.05		1:A:53:PRO:HB2	1:A:54:SER:H	7	0.06
(1,1093) 1:A:40:HIS:H 1:A:40:HIS:HB2 13 0.06 (1,108) 1:A:48:GLY:H 1:A:49:GLN:H 17 0.06 (1,85) 1:A:24:THR:HB 1:A:25:GLN:H 12 0.05 (1,85) 1:A:24:THR:HB 1:A:25:GLN:H 19 0.05 (1,665) 1:A:131:ALA:HA 1:A:153:LEU:HB3 7 0.05	(1,1121)	1:A:52:SER:H	1:A:52:SER:HB2	17	0.06
(1,108) 1:A:48:GLY:H 1:A:49:GLN:H 17 0.06 (1,85) 1:A:24:THR:HB 1:A:25:GLN:H 12 0.05 (1,85) 1:A:24:THR:HB 1:A:25:GLN:H 19 0.05 (1,665) 1:A:131:ALA:HA 1:A:153:LEU:HB3 7 0.05	(1,1093)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB2	13	0.06
(1,85) 1:A:24:THR:HB 1:A:25:GLN:H 12 0.05 (1,85) 1:A:24:THR:HB 1:A:25:GLN:H 19 0.05 (1,665) 1:A:131:ALA:HA 1:A:153:LEU:HB3 7 0.05		1:A:48:GLY:H	1:A:49:GLN:H	17	0.06
(1,85) 1:A:24:THR:HB 1:A:25:GLN:H 19 0.05 (1,665) 1:A:131:ALA:HA 1:A:153:LEU:HB3 7 0.05		1:A:24:THR:HB	1:A:25:GLN:H	12	0.05
(1,665) 1:A:131:ALA:HA 1:A:153:LEU:HB3 7 0.05		1:A:24:THR:HB	1:A:25:GLN:H	19	0.05
	· · /	1:A:131:ALA:HA	1:A:153:LEU:HB3	7	0.05
(1,665) 1:A:131:ALA:HA 1:A:153:LEU:HB3 15 0.05	(1,665)	1:A:131:ALA:HA	1:A:153:LEU:HB3	15	0.05



Continued from previous page...

(1,664) 1:A:134:ILE:HB 1:A:149:THR:HB 20 0.05 (1,633) 1:A:11:LEU:HB2 1:A:12:LYS:H 7 0.05 (1,63) 1:A:11:LEU:HB2 1:A:12:LYS:H 7 0.05 (1,615) 1:A:108:GLU:HG3 1:A:109:ILE:H 5 0.05 (1,615) 1:A:96:LYS:H 1:A:96:LYS:HD2 17 0.05 (1,665) 1:A:96:LYS:H 1:A:96:LYS:HD2 17 0.05 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 6 0.05 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 7 0.05 (1,470) 1:A:31:LEU:H 1:A:103:ILE:HB2 17 0.05 (1,470) 1:A:31:LEU:H 1:A:31:LEU:HB2 11 0.05 (1,470) 1:A:31:LEU:H 1:A:135:LEU:HB2 11 0.05 (1,411) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 7 0.05 (1,411) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 12 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 14	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,63) 1:A:11:LEU:HB2 1:A:12:LYS:H 7 0.05 (1,63) 1:A:11:LEU:HB2 1:A:12:LYS:H 14 0.05 (1,615) 1:A:108:GLU:HG3 1:A:109:LE:H 5 0.05 (1,612) 1:A:96:LYS:HG3 1:A:96:LYS:HD2 17 0.05 (1,565) 1:A:96:LYS:HB 1:A:96:LYS:HD2 17 0.05 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 6 0.05 (1,473) 1:A:103:ILE:H 1:A:103:ILE:HB 17 0.05 (1,473) 1:A:131:LEU:H 1:A:131:LEU:HB2 11 0.05 (1,470) 1:A:31:LEU:H 1:A:135:LEU:HB2 11 0.05 (1,43) 1:A:38:AA:AO 1:A:135:TYR:H 7 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 7 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 9 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:145:ASP:H 12 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 13 <td< td=""><td>(1,664)</td><td>1:A:134:ILE:HB</td><td>1:A:149:THR:HA</td><td>20</td><td>0.05</td></td<>	(1,664)	1:A:134:ILE:HB	1:A:149:THR:HA	20	0.05
(1,615) 1:A:11:LEU:HB2 1:A:12:LYS:H 14 0.05 (1,615) 1:A:108:GLU:HG3 1:A:109:ILE:H 5 0.05 (1,612) 1:A:96:LYS:H 3 1:A:97:ALA:H 14 0.05 (1,565) 1:A:96:LYS:H 1:A:96:LYS:HD2 17 0.05 (1,4565) 1:A:96:LYS:H 1:A:96:LYS:HD2 17 0.05 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 6 0.05 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 7 0.05 (1,473) 1:A:103:ILE:H 1:A:103:ILE:HB 17 0.05 (1,470) 1:A:31:LEU:H 1:A:31:LEU:HB2 11 0.05 (1,470) 1:A:31:LEU:H 1:A:31:LEU:HB2 11 0.05 (1,411) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 7 0.05 (1,411) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 9 0.05 (1,411) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 12 0.05 (1,411) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 12 0.05 (1,411) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 14 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 13 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 3 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 16 0.05 (1,385) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 16 0.05 (1,385) 1:A:144:PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 16 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 16 0.05 (1,387) 1:A:144:PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 16 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HG3 1:A:145:ASP:H 16 0.05 (1,374) 1:A:53:PRO:HG3 1:A:154:SER:H 18 0.05 (1,372) 1:A:51:LYS:HD3 1:A:25:SER:H 1 0.05 (1,351) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 7 0.05 (1,351) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 7 0.05 (1,351) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 5 0.05 (1,351) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,371) 1:A:12:LEU:O 1:A:14:ASP:H 19 0.05 (1,371) 1:A:12:LEU:O 1:A:14:ASP:H 19 0.05 (1,271) 1:A:12:LEU:O 1:A:15:LEU:O 1:A:15:	(1,633)	1:A:102:TYR:HA	1:A:149:THR:HB	18	0.05
(1,615) 1:A:108:GLU:HG3 1:A:97:ALA:H 14 0.05 (1,612) 1:A:96:LYS:HG3 1:A:97:ALA:H 14 0.05 (1,665) 1:A:96:LYS:H 1:A:96:LYS:HD2 17 0.05 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 6 0.05 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 7 0.05 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 7 0.05 (1,473) 1:A:103:ILE:H 1:A:103:ILE:HB 17 0.05 (1,470) 1:A:31:LEU:H 1:A:31:LEU:HB2 11 0.05 (1,470) 1:A:31:LEU:H 1:A:31:LEU:HB2 11 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 7 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 9 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 9 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 12 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 14 0.05 (1,387) 1:A:144:PRO:IID3 1:A:145:ASP:H 13 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:IID3 1:A:145:ASP:H 13 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:IID3 1:A:145:ASP:H 13 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:IID3 1:A:145:ASP:H 16 0.05 (1,385) 1:A:144:PRO:IID3 1:A:145:ASP:H 10 0.05 (1,385) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 5 0.05 (1,355) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 5 0.05 (1,355) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 5 0.05 (1,355) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,333) 1:A:110:GLU:O 1:A:14:ASP:H 16 0.05 (1,277) 1:A:21:LEU:O 1:A:28:VAL:H 12 0.05 (1,299) 1:A:19:ALA:O 1:A:90:GLY:H 16 0.	(1,63)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:12:LYS:H	7	0.05
(1,612) 1:A:96:LYS:HG3 1:A:97:ALA:H 14 0.05 (1,565) 1:A:96:LYS:H 1:A:96:LYS:HD2 17 0.05 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 7 0.05 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 7 0.05 (1,472) 1:A:103:ILE:H 1:A:103:ILE:HB 17 0.05 (1,470) 1:A:31:LEU:H 1:A:153:LEU:HB2 11 0.05 (1,43) 1:A:98:ALA:O 1:A:153:LEU:H 16 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 7 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 9 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 12 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 12 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 12 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:145:ASP:H 13 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 13 0.05 <td>(1,63)</td> <td>1:A:11:LEU:HB2</td> <td>1:A:12:LYS:H</td> <td>14</td> <td>0.05</td>	(1,63)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:12:LYS:H	14	0.05
(1,565) 1:A:96:LYS:H 1:A:96:LYS:HD2 17 0.05 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 6 0.05 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 7 0.05 (1,473) 1:A:103:IE:H 1:A:103:IE:HB 17 0.05 (1,470) 1:A:31:LEU:H 1:A:131:LEU:HB2 11 0.05 (1,43) 1:A:98:ALA:O 1:A:153:LEU:H 16 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 7 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 9 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 12 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 12 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 12 0.05 (1,341) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 13 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 13 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 16 0.05 <td>(1,615)</td> <td>1:A:108:GLU:HG3</td> <td>1:A:109:ILE:H</td> <td>5</td> <td>0.05</td>	(1,615)	1:A:108:GLU:HG3	1:A:109:ILE:H	5	0.05
(1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 6 0.05 (1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 7 0.05 (1,473) 1:A:103:ILE:H 1:A:103:ILE:HB 17 0.05 (1,470) 1:A:31:LEU:H 1:A:31:LEU:HB2 11 0.05 (1,43) 1:A:98:ALA:O 1:A:153:LEU:H 16 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 7 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 9 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 12 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 12 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 14 0.05 (1,387) 1:A:144:PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 13 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 16 0.05 (1,385) 1:A:144:PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 16 0.05 (1,372) 1:A:55:IVS:HD3 1:A:145:ASP:H 16 0.	(1,612)	1:A:96:LYS:HG3	1:A:97:ALA:H	14	0.05
(1,492) 1:A:81:VAL:HB 1:A:82:GLU:H 7 0.05 (1,473) 1:A:103:ILE:H 1:A:103:ILE:HB 17 0.05 (1,470) 1:A:31:LEU:H 1:A:103:ILEU:HB2 11 0.05 (1,43) 1:A:98:ALA:O 1:A:153:LEU:H 16 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 7 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 9 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 12 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 12 0.05 (1,341) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 12 0.05 (1,387) 1:A:144:PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 13 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 3 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 16 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 16 0.05 (1,387) 1:A:61:TYS:HD3 1:A:52:SER:H 18 <	(1,565)	1:A:96:LYS:H	1:A:96:LYS:HD2	17	0.05
(1,473) 1:A:103:ILE:H 1:A:103:ILE:HB 17 0.05 (1,470) 1:A:31:LEU:H 1:A:31:LEU:HB2 11 0.05 (1,43) 1:A:98:ALA:O 1:A:153:LEU:H 16 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 7 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 9 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 12 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 12 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 12 0.05 (1,387) 1:A:144:PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 13 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 3 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HG3 1:A:145:ASP:H 16 0.05 (1,374) 1:A:53:PRO:HG3 1:A:64:SSP:H 18 0.05 (1,372) 1:A:61:TYR:OHG3 1:A:52:SER:H 1 0.05 (1,335) 1:A:61:TYR:OHG3 1:A:131:ALA:H 7 <th< td=""><td>(1,492)</td><td>1:A:81:VAL:HB</td><td>1:A:82:GLU:H</td><td>6</td><td>0.05</td></th<>	(1,492)	1:A:81:VAL:HB	1:A:82:GLU:H	6	0.05
(1,470) 1:A:31:LEU:H 1:A:31:LEU:HB2 11 0.05 (1,43) 1:A:98:ALA:O 1:A:153:LEU:H 16 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 7 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 9 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 12 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 14 0.05 (1,387) 1:A:144:PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 14 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 3 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 16 0.05 (1,385) 1:A:144:PRO:HG3 1:A:145:ASP:H 10 0.05 (1,385) 1:A:144:PRO:HG3 1:A:145:ASP:H 10 0.05 (1,374) 1:A:53:PRO:HG3 1:A:54:SER:H 18 0.05 (1,372) 1:A:51:TYS:HD3 1:A:52:SER:H 1 0.05 (1,375) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 7 <t< td=""><td>(1,492)</td><td>1:A:81:VAL:HB</td><td>1:A:82:GLU:H</td><td>7</td><td>0.05</td></t<>	(1,492)	1:A:81:VAL:HB	1:A:82:GLU:H	7	0.05
(1,43) 1:A:98:ALA:O 1:A:153:LEU:H 16 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 7 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 9 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 12 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 14 0.05 (1,387) 1:A:144:PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 13 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 3 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HG3 1:A:145:ASP:H 16 0.05 (1,385) 1:A:144:PRO:HG3 1:A:145:ASP:H 10 0.05 (1,385) 1:A:144:PRO:HG3 1:A:145:ASP:H 10 0.05 (1,374) 1:A:53:PRO:HG3 1:A:52:SER:H 18 0.05 (1,372) 1:A:51:LYS:HD3 1:A:52:SER:H 1 0.05 (1,374) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 7 0.05 (1,355) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 7	(1,473)	1:A:103:ILE:H	1:A:103:ILE:HB	17	0.05
(1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 7 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 9 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 12 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 14 0.05 (1,387) 1:A:144:PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 13 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 3 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HG3 1:A:145:ASP:H 16 0.05 (1,385) 1:A:144:PRO:HG3 1:A:145:ASP:H 10 0.05 (1,374) 1:A:53:PRO:HG3 1:A:54:SER:H 18 0.05 (1,374) 1:A:53:PRO:HG3 1:A:52:SER:H 1 0.05 (1,374) 1:A:61:TYS:HD3 1:A:62:THR:H 7 0.05 (1,374) 1:A:61:TYS:O 1:A:131:ALA:H 7 0.05 (1,368) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 7 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 7 0.05	(1,470)	1:A:31:LEU:H	1:A:31:LEU:HB2	11	0.05
(1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 9 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 12 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 14 0.05 (1,387) 1:A:144:PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 13 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 3 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 16 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HG3 1:A:145:ASP:H 10 0.05 (1,385) 1:A:144:PRO:HG3 1:A:145:ASP:H 10 0.05 (1,374) 1:A:53:PRO:HG3 1:A:54:SER:H 18 0.05 (1,374) 1:A:51:LYS:HD3 1:A:52:SER:H 1 0.05 (1,372) 1:A:61:TYS:HD3 1:A:65:PRE:H 7 0.05 (1,368) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 7 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 7 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 <th< td=""><td>(1,43)</td><td>1:A:98:ALA:O</td><td>1:A:153:LEU:H</td><td>16</td><td>0.05</td></th<>	(1,43)	1:A:98:ALA:O	1:A:153:LEU:H	16	0.05
(1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 12 0.05 (1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 14 0.05 (1,387) 1:A:144:PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 13 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 3 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HG3 1:A:145:ASP:H 16 0.05 (1,385) 1:A:144:PRO:HG3 1:A:145:ASP:H 10 0.05 (1,374) 1:A:53:PRO:HG3 1:A:54:SER:H 18 0.05 (1,372) 1:A:61:LYS:HD3 1:A:52:SER:H 1 0.05 (1,368) 1:A:25:GLN:HG3 1:A:26:THR:H 7 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 5 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 12 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 12 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.	(1,41)	1:A:57:PRO:O	1:A:135:TYR:H	7	0.05
(1,41) 1:A:57:PRO:O 1:A:135:TYR:H 14 0.05 (1,387) 1:A:144:PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 13 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 3 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 16 0.05 (1,385) 1:A:144:PRO:HG3 1:A:145:ASP:H 10 0.05 (1,374) 1:A:53:PRO:HG3 1:A:54:SER:H 18 0.05 (1,372) 1:A:51:LYS:HD3 1:A:52:SER:H 1 0.05 (1,368) 1:A:25:GLN:HG3 1:A:26:THR:H 7 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 5 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 12 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 13 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,34) 1:A:26:THR:H 1:A:69:PHE:H 18 0.0	(1,41)	1:A:57:PRO:O	1:A:135:TYR:H	9	0.05
(1,387) 1:A:144:PRO:HD3 1:A:145:ASP:H 13 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 3 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 16 0.05 (1,385) 1:A:144:PRO:HG3 1:A:45:ASP:H 10 0.05 (1,374) 1:A:53:PRO:HG3 1:A:54:SER:H 18 0.05 (1,372) 1:A:51:LYS:HD3 1:A:52:SER:H 1 0.05 (1,368) 1:A:25:GLN:HG3 1:A:26:THR:H 7 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 5 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 7 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 12 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 13 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,34) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,34) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05	(1,41)	1:A:57:PRO:O	1:A:135:TYR:H	12	0.05
(1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 3 0.05 (1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 16 0.05 (1,385) 1:A:144:PRO:HG3 1:A:54:SER:H 10 0.05 (1,374) 1:A:53:PRO:HG3 1:A:54:SER:H 18 0.05 (1,372) 1:A:51:LYS:HD3 1:A:52:SER:H 1 0.05 (1,368) 1:A:25:GLN:HG3 1:A:26:THR:H 7 0.05 (1,368) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 5 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 7 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 12 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 13 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,340) 1:A:26:THR:H 1:A:69:PHE:H 18 0.05 (1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 16 0.05 (1,33) 1:A:110:GLU:O 1:A:114:ASP:H 15 0.	(1,41)	1:A:57:PRO:O	1:A:135:TYR:H	14	0.05
(1,386) 1:A:144:PRO:HD2 1:A:145:ASP:H 16 0.05 (1,385) 1:A:144:PRO:HG3 1:A:145:ASP:H 10 0.05 (1,374) 1:A:53:PRO:HG3 1:A:54:SER:H 18 0.05 (1,372) 1:A:51:LYS:HD3 1:A:52:SER:H 1 0.05 (1,368) 1:A:25:GLN:HG3 1:A:26:THR:H 7 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 5 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 7 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 12 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 13 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,346) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,344) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 16 0.05 (1,341) 1:A:110:GLU:O 1:A:114:ASP:H 15 0.0	(1,387)	1:A:144:PRO:HD3	1:A:145:ASP:H	13	0.05
(1,385) 1:A:144:PRO:HG3 1:A:145:ASP:H 10 0.05 (1,374) 1:A:53:PRO:HG3 1:A:54:SER:H 18 0.05 (1,372) 1:A:51:LYS:HD3 1:A:52:SER:H 1 0.05 (1,368) 1:A:25:GLN:HG3 1:A:26:THR:H 7 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 5 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 7 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 12 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 13 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,34) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,34) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,341) 1:A:121:CEU:HB2 1:A:121:CEU:HB2 1:A:121:CEU:HB2 15 0.05 (1,33) 1:A:110:GLU:O 1:A:114:ASP:H	(1,386)	1:A:144:PRO:HD2	1:A:145:ASP:H	3	0.05
(1,374) 1:A:53:PRO:HG3 1:A:54:SER:H 18 0.05 (1,372) 1:A:51:LYS:HD3 1:A:52:SER:H 1 0.05 (1,368) 1:A:25:GLN:HG3 1:A:26:THR:H 7 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 5 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 7 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 12 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 13 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,34) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,344) 1:A:26:THR:H 1:A:69:PHE:H 18 0.05 (1,341) 1:A:110:GLU:O 1:A:114:ASP:H 16 0.05 (1,33) 1:A:110:GLU:O 1:A:114:ASP:H 19 0.05 (1,328) 1:A:47:ALA:HA 1:A:47:ALA:H 1 0.05 <	(1,386)	1:A:144:PRO:HD2	1:A:145:ASP:H	16	0.05
(1,372) 1:A:51:LYS:HD3 1:A:52:SER:H 1 0.05 (1,368) 1:A:25:GLN:HG3 1:A:26:THR:H 7 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 5 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 7 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 12 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 13 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,34) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,34) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 18 0.05 (1,34) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 18 0.05 (1,34) 1:A:10:GLU:HB2 18 0.05 (1,33) 1:A:110:GLU:O 1:A:114:ASP:H 19 0.05 (1,328)	(1,385)	1:A:144:PRO:HG3	1:A:145:ASP:H	10	0.05
(1,368) 1:A:25:GLN:HG3 1:A:26:THR:H 7 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 5 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 7 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 12 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 13 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,34) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,346) 1:A:26:THR:H 1:A:69:PHE:H 18 0.05 (1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 16 0.05 (1,33) 1:A:110:GLU:O 1:A:114:ASP:H 15 0.05 (1,33) 1:A:47:ALA:HA 1:A:51:LYS:H 17 0.05 (1,328) 1:A:47:ALA:HA 1:A:47:ALA:H 13 0.05 (1,327) 1:A:44:GLN:HA 1:A:47:ALA:H 13 0.05	(1,374)	1:A:53:PRO:HG3	1:A:54:SER:H	18	0.05
(1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 5 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 7 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 12 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 13 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,346) 1:A:26:THR:H 1:A:69:PHE:H 18 0.05 (1,346) 1:A:27:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 16 0.05 (1,341) 1:A:10:GLU:O 1:A:114:ASP:H 15 0.05 (1,33) 1:A:110:GLU:O 1:A:114:ASP:H 19 0.05 (1,33) 1:A:47:ALA:HA 1:A:51:LYS:H 17 0.05 (1,328) 1:A:47:ALA:HA 1:A:47:ALA:H 13 0.05 (1,327) 1:A:44:GLN:HA 1:A:47:ALA:H 13 0.05 (1,323) 1:A:27:ALA:H 1:A:30:GLU:HB2 8 0.05 (1,31) 1:A:19:ALA:O 1:A:97:ALA:H 20 0.05 <	(1,372)	1:A:51:LYS:HD3	1:A:52:SER:H	1	0.05
(1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 7 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 12 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 13 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,346) 1:A:62:THR:H 1:A:69:PHE:H 18 0.05 (1,346) 1:A:26:THR:H 1:A:69:PHE:H 18 0.05 (1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 16 0.05 (1,33) 1:A:110:GLU:O 1:A:114:ASP:H 15 0.05 (1,33) 1:A:410:GLU:O 1:A:114:ASP:H 19 0.05 (1,328) 1:A:47:ALA:HA 1:A:51:LYS:H 17 0.05 (1,327) 1:A:44:GLN:HA 1:A:47:ALA:H 13 0.05 (1,323) 1:A:27:ALA:H 1:A:30:GLU:HB2 8 0.05 (1,31) 1:A:19:ALA:O 1:A:97:ALA:H 20 0.05	(1,368)	1:A:25:GLN:HG3	1:A:26:THR:H	7	0.05
(1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 12 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 13 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,346) 1:A:26:THR:H 1:A:69:PHE:H 18 0.05 (1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 16 0.05 (1,331) 1:A:110:GLU:O 1:A:114:ASP:H 19 0.05 (1,33) 1:A:110:GLU:O 1:A:114:ASP:H 19 0.05 (1,328) 1:A:47:ALA:HA 1:A:51:LYS:H 17 0.05 (1,328) 1:A:44:GLN:HA 1:A:47:ALA:H 13 0.05 (1,327) 1:A:44:GLN:HA 1:A:30:GLU:HB2 8 0.05 (1,323) 1:A:27:ALA:H 1:A:30:GLU:HB2 8 0.05 (1,31) 1:A:12:LYS:O 1:A:97:ALA:H 20 0.05 (1,29) 1:A:19:ALA:O 1:A:90:GLY:H 8 0.05 (1,29) 1:A:19:ALA:O 1:A:88:VAL:H 12 0.05	(1,35)	1:A:61:TYR:O	1:A:131:ALA:H	5	0.05
(1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 13 0.05 (1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,346) 1:A:26:THR:H 1:A:69:PHE:H 18 0.05 (1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 16 0.05 (1,331) 1:A:110:GLU:O 1:A:114:ASP:H 15 0.05 (1,33) 1:A:110:GLU:O 1:A:14:ASP:H 19 0.05 (1,328) 1:A:47:ALA:HA 1:A:51:LYS:H 17 0.05 (1,327) 1:A:44:GLN:HA 1:A:47:ALA:H 13 0.05 (1,323) 1:A:27:ALA:H 1:A:30:GLU:HB2 8 0.05 (1,31) 1:A:12:LYS:O 1:A:97:ALA:H 20 0.05 (1,29) 1:A:19:ALA:O 1:A:90:GLY:H 8 0.05 (1,29) 1:A:19:ALA:O 1:A:88:VAL:H 12 0.05 (1,27) 1:A:21:LEU:O 1:A:88:VAL:H 12 0.05 (1,265) 1:A:20:LEU:O 1:A:75:PHE:H 2 0.05 <td>(1,35)</td> <td>1:A:61:TYR:O</td> <td>1:A:131:ALA:H</td> <td>7</td> <td>0.05</td>	(1,35)	1:A:61:TYR:O	1:A:131:ALA:H	7	0.05
(1,35) 1:A:61:TYR:O 1:A:131:ALA:H 15 0.05 (1,346) 1:A:26:THR:H 1:A:69:PHE:H 18 0.05 (1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 16 0.05 (1,33) 1:A:110:GLU:O 1:A:114:ASP:H 15 0.05 (1,33) 1:A:110:GLU:O 1:A:114:ASP:H 19 0.05 (1,33) 1:A:47:ALA:HA 1:A:51:LYS:H 17 0.05 (1,328) 1:A:47:ALA:HA 1:A:47:ALA:H 13 0.05 (1,327) 1:A:44:GLN:HA 1:A:30:GLU:HB2 8 0.05 (1,323) 1:A:27:ALA:H 1:A:30:GLU:HB2 8 0.05 (1,31) 1:A:12:LYS:O 1:A:97:ALA:H 20 0.05 (1,29) 1:A:19:ALA:O 1:A:90:GLY:H 8 0.05 (1,29) 1:A:19:ALA:O 1:A:90:GLY:H 16 0.05 (1,27) 1:A:21:LEU:O 1:A:88:VAL:H 12 0.05 (1,265) 1:A:20:LEU:O 1:A:75:PHE:H 2 0.05 </td <td>(1,35)</td> <td>1:A:61:TYR:O</td> <td>1:A:131:ALA:H</td> <td>12</td> <td>0.05</td>	(1,35)	1:A:61:TYR:O	1:A:131:ALA:H	12	0.05
(1,346) 1:A:26:THR:H 1:A:69:PHE:H 18 0.05 (1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 16 0.05 (1,33) 1:A:110:GLU:O 1:A:114:ASP:H 15 0.05 (1,33) 1:A:110:GLU:O 1:A:114:ASP:H 19 0.05 (1,328) 1:A:47:ALA:HA 1:A:51:LYS:H 17 0.05 (1,327) 1:A:44:GLN:HA 1:A:47:ALA:H 13 0.05 (1,323) 1:A:27:ALA:H 1:A:30:GLU:HB2 8 0.05 (1,31) 1:A:12:LYS:O 1:A:97:ALA:H 20 0.05 (1,29) 1:A:19:ALA:O 1:A:90:GLY:H 8 0.05 (1,29) 1:A:19:ALA:O 1:A:90:GLY:H 16 0.05 (1,27) 1:A:21:LEU:O 1:A:88:VAL:H 12 0.05 (1,265) 1:A:20:LEU:O 1:A:75:PHE:H 2 0.05 (1,25) 1:A:20:LEU:O 1:A:75:PHE:H 2 0.05	(1,35)	1:A:61:TYR:O	1:A:131:ALA:H	13	0.05
(1,341) 1:A:127:LEU:HB2 1:A:129:GLY:H 16 0.05 (1,33) 1:A:110:GLU:O 1:A:114:ASP:H 15 0.05 (1,33) 1:A:110:GLU:O 1:A:114:ASP:H 19 0.05 (1,328) 1:A:47:ALA:HA 1:A:51:LYS:H 17 0.05 (1,327) 1:A:44:GLN:HA 1:A:47:ALA:H 13 0.05 (1,323) 1:A:27:ALA:H 1:A:30:GLU:HB2 8 0.05 (1,31) 1:A:12:LYS:O 1:A:97:ALA:H 20 0.05 (1,29) 1:A:19:ALA:O 1:A:90:GLY:H 8 0.05 (1,29) 1:A:19:ALA:O 1:A:90:GLY:H 16 0.05 (1,27) 1:A:21:LEU:O 1:A:88:VAL:H 12 0.05 (1,265) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB2 20 0.05 (1,25) 1:A:20:LEU:O 1:A:75:PHE:H 2 0.05	(1,35)	1:A:61:TYR:O	1:A:131:ALA:H	15	0.05
(1,33) 1:A:110:GLU:O 1:A:114:ASP:H 15 0.05 (1,33) 1:A:110:GLU:O 1:A:114:ASP:H 19 0.05 (1,328) 1:A:47:ALA:HA 1:A:51:LYS:H 17 0.05 (1,327) 1:A:44:GLN:HA 1:A:47:ALA:H 13 0.05 (1,323) 1:A:27:ALA:H 1:A:30:GLU:HB2 8 0.05 (1,31) 1:A:12:LYS:O 1:A:97:ALA:H 20 0.05 (1,29) 1:A:19:ALA:O 1:A:90:GLY:H 8 0.05 (1,29) 1:A:19:ALA:O 1:A:90:GLY:H 16 0.05 (1,27) 1:A:21:LEU:O 1:A:88:VAL:H 12 0.05 (1,265) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB2 20 0.05 (1,25) 1:A:20:LEU:O 1:A:75:PHE:H 2 0.05	(1,346)	1:A:26:THR:H	1:A:69:PHE:H	18	0.05
(1,33) 1:A:110:GLU:O 1:A:114:ASP:H 19 0.05 (1,328) 1:A:47:ALA:HA 1:A:51:LYS:H 17 0.05 (1,327) 1:A:44:GLN:HA 1:A:47:ALA:H 13 0.05 (1,323) 1:A:27:ALA:H 1:A:30:GLU:HB2 8 0.05 (1,31) 1:A:12:LYS:O 1:A:97:ALA:H 20 0.05 (1,29) 1:A:19:ALA:O 1:A:90:GLY:H 8 0.05 (1,29) 1:A:19:ALA:O 1:A:90:GLY:H 16 0.05 (1,27) 1:A:21:LEU:O 1:A:88:VAL:H 12 0.05 (1,265) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB2 20 0.05 (1,25) 1:A:20:LEU:O 1:A:75:PHE:H 2 0.05	(1,341)	1:A:127:LEU:HB2	1:A:129:GLY:H	16	0.05
(1,328) 1:A:47:ALA:HA 1:A:51:LYS:H 17 0.05 (1,327) 1:A:44:GLN:HA 1:A:47:ALA:H 13 0.05 (1,323) 1:A:27:ALA:H 1:A:30:GLU:HB2 8 0.05 (1,31) 1:A:12:LYS:O 1:A:97:ALA:H 20 0.05 (1,29) 1:A:19:ALA:O 1:A:90:GLY:H 8 0.05 (1,29) 1:A:19:ALA:O 1:A:90:GLY:H 16 0.05 (1,27) 1:A:21:LEU:O 1:A:88:VAL:H 12 0.05 (1,265) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB2 20 0.05 (1,25) 1:A:20:LEU:O 1:A:75:PHE:H 2 0.05	(1,33)	1:A:110:GLU:O	1:A:114:ASP:H	15	0.05
(1,327) 1:A:44:GLN:HA 1:A:47:ALA:H 13 0.05 (1,323) 1:A:27:ALA:H 1:A:30:GLU:HB2 8 0.05 (1,31) 1:A:12:LYS:O 1:A:97:ALA:H 20 0.05 (1,29) 1:A:19:ALA:O 1:A:90:GLY:H 8 0.05 (1,29) 1:A:19:ALA:O 1:A:90:GLY:H 16 0.05 (1,29) 1:A:21:LEU:O 1:A:88:VAL:H 12 0.05 (1,27) 1:A:21:LEU:O 1:A:88:VAL:H 12 0.05 (1,265) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB2 20 0.05 (1,25) 1:A:20:LEU:O 1:A:75:PHE:H 2 0.05	(1,33)	1:A:110:GLU:O	1:A:114:ASP:H	19	0.05
(1,323) 1:A:27:ALA:H 1:A:30:GLU:HB2 8 0.05 (1,31) 1:A:12:LYS:O 1:A:97:ALA:H 20 0.05 (1,29) 1:A:19:ALA:O 1:A:90:GLY:H 8 0.05 (1,29) 1:A:19:ALA:O 1:A:90:GLY:H 16 0.05 (1,27) 1:A:21:LEU:O 1:A:88:VAL:H 12 0.05 (1,265) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB2 20 0.05 (1,25) 1:A:20:LEU:O 1:A:75:PHE:H 2 0.05		1:A:47:ALA:HA	1:A:51:LYS:H	17	0.05
(1,323) 1:A:27:ALA:H 1:A:30:GLU:HB2 8 0.05 (1,31) 1:A:12:LYS:O 1:A:97:ALA:H 20 0.05 (1,29) 1:A:19:ALA:O 1:A:90:GLY:H 8 0.05 (1,29) 1:A:19:ALA:O 1:A:90:GLY:H 16 0.05 (1,27) 1:A:21:LEU:O 1:A:88:VAL:H 12 0.05 (1,265) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB2 20 0.05 (1,25) 1:A:20:LEU:O 1:A:75:PHE:H 2 0.05	(1,327)	1:A:44:GLN:HA	1:A:47:ALA:H	13	0.05
(1,29) 1:A:19:ALA:O 1:A:90:GLY:H 8 0.05 (1,29) 1:A:19:ALA:O 1:A:90:GLY:H 16 0.05 (1,27) 1:A:21:LEU:O 1:A:88:VAL:H 12 0.05 (1,265) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB2 20 0.05 (1,25) 1:A:20:LEU:O 1:A:75:PHE:H 2 0.05		1:A:27:ALA:H	1:A:30:GLU:HB2	8	0.05
(1,29) 1:A:19:ALA:O 1:A:90:GLY:H 8 0.05 (1,29) 1:A:19:ALA:O 1:A:90:GLY:H 16 0.05 (1,27) 1:A:21:LEU:O 1:A:88:VAL:H 12 0.05 (1,265) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB2 20 0.05 (1,25) 1:A:20:LEU:O 1:A:75:PHE:H 2 0.05	(1,31)	1:A:12:LYS:O	1:A:97:ALA:H	20	0.05
(1,29) 1:A:19:ALA:O 1:A:90:GLY:H 16 0.05 (1,27) 1:A:21:LEU:O 1:A:88:VAL:H 12 0.05 (1,265) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB2 20 0.05 (1,25) 1:A:20:LEU:O 1:A:75:PHE:H 2 0.05		1:A:19:ALA:O	1:A:90:GLY:H	8	0.05
(1,27) 1:A:21:LEU:O 1:A:88:VAL:H 12 0.05 (1,265) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB2 20 0.05 (1,25) 1:A:20:LEU:O 1:A:75:PHE:H 2 0.05	(1,29)	1:A:19:ALA:O	1:A:90:GLY:H	16	0.05
(1,265) 1:A:125:PHE:H 1:A:125:PHE:HB2 20 0.05 (1,25) 1:A:20:LEU:O 1:A:75:PHE:H 2 0.05		1:A:21:LEU:O	1:A:88:VAL:H	12	0.05
(1,25) 1:A:20:LEU:O 1:A:75:PHE:H 2 0.05		1:A:125:PHE:H	1:A:125:PHE:HB2	20	0.05
	· · /	1:A:20:LEU:O	1:A:75:PHE:H	2	0.05
	(1,249)		1:A:101:LEU:HB3	16	



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,248)	1:A:101:LEU:H	1:A:101:LEU:HB2	18	0.05
(1,23)	1:A:60:ARG:O	1:A:72:GLU:H	18	0.05
(1,229)	1:A:31:LEU:H	1:A:31:LEU:HB3	14	0.05
(1,220)	1:A:7:PHE:H	1:A:7:PHE:HB2	15	0.05
(1,217)	1:A:160:GLU:HA	1:A:161:HIS:H	7	0.05
(1,21)	1:A:62:PHE:O	1:A:70:GLU:H	16	0.05
(1,198)	1:A:139:PRO:HB3	1:A:140:ALA:H	3	0.05
(1,184)	1:A:125:PHE:HB2	1:A:126:ASP:H	7	0.05
(1,17)	1:A:60:ARG:H	1:A:72:GLU:O	8	0.05
(1,14)	1:A:58:PHE:N	1:A:74:GLY:O	7	0.05
(1,14)	1:A:58:PHE:N	1:A:74:GLY:O	12	0.05
(1,14)	1:A:58:PHE:N	1:A:74:GLY:O	20	0.05
(1,13)	1:A:58:PHE:H	1:A:74:GLY:O	3	0.05
(1,13)	1:A:58:PHE:H	1:A:74:GLY:O	18	0.05
(1,123)	1:A:69:PHE:HB2	1:A:70:GLU:H	12	0.05
(1,123)	1:A:69:PHE:HB2	1:A:70:GLU:H	15	0.05
(1,1193)	1:A:141:GLU:H	1:A:141:GLU:HB2	1	0.05
(1,1181)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:122:ASP:H	2	0.05
(1,1142)	1:A:82:GLU:H	1:A:82:GLU:HB2	13	0.05
(1,111)	1:A:51:LYS:HB3	1:A:52:SER:H	1	0.05
(1,1109)	1:A:49:GLN:HE21	1:A:82:GLU:HB2	1	0.05
(1,110)	1:A:51:LYS:HB2	1:A:52:SER:H	10	0.05
(1,1050)	1:A:17:VAL:HB	1:A:76:PRO:HB2	3	0.05
(1,1018)	1:A:9:CYS:HB2	1:A:10:GLU:H	11	0.05
(1,85)	1:A:24:THR:HB	1:A:25:GLN:H	8	0.04
(1,7)	1:A:24:THR:H	1:A:71:VAL:O	5	0.04
(1,666)	1:A:131:ALA:HA	1:A:153:LEU:HB2	5	0.04
(1,664)	1:A:134:ILE:HB	1:A:149:THR:HA	5	0.04
(1,664)	1:A:134:ILE:HB	1:A:149:THR:HA	10	0.04
(1,642)	1:A:109:ILE:HG13	1:A:113:TYR:HD1	18	0.04
(1,638)	1:A:58:PHE:HB2	1:A:132:TYR:HE1	4	0.04
(1,636)	1:A:11:LEU:HG	1:A:119:TRP:HH2	14	0.04
(1,63)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:12:LYS:H	5	0.04
(1,60)	1:A:10:GLU:HB2	1:A:11:LEU:H	6	0.04
(1,60)	1:A:10:GLU:HB2	1:A:11:LEU:H	11	0.04
(1,572)	1:A:96:LYS:HA	1:A:96:LYS:HE3	10	0.04
(1,506)	1:A:25:GLN:HA	1:A:26:THR:HB	1	0.04
(1,470)	1:A:31:LEU:H	1:A:31:LEU:HB2	4	0.04
(1,41)	1:A:57:PRO:O	1:A:135:TYR:H	11	0.04
(1,41)	1:A:57:PRO:O	1:A:135:TYR:H	17	0.04
(1,387)	1:A:144:PRO:HD3	1:A:145:ASP:H	3	0.04
(1,387)	1:A:144:PRO:HD3	1:A:145:ASP:H	17	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,387)	1:A:144:PRO:HD3	1:A:145:ASP:H	19	0.04
(1,384)	1:A:144:PRO:HG2	1:A:145:ASP:H	8	0.04
(1,377)	1:A:96:LYS:HD2	1:A:97:ALA:H	11	0.04
(1,373)	1:A:53:PRO:HG2	1:A:54:SER:H	15	0.04
(1,371)	1:A:51:LYS:HD2	1:A:52:SER:H	4	0.04
(1,360)	1:A:84:SER:H	1:A:87:VAL:H	18	0.04
(1,357)	1:A:49:GLN:H	1:A:51:LYS:H	4	0.04
(1,357)	1:A:49:GLN:H	1:A:51:LYS:H	5	0.04
(1,351)	1:A:10:GLU:H	1:A:99:SER:H	8	0.04
(1,35)	1:A:61:TYR:O	1:A:131:ALA:H	8	0.04
(1,346)	1:A:26:THR:H	1:A:69:PHE:H	4	0.04
(1,343)	1:A:97:ALA:HA	1:A:155:LEU:H	14	0.04
(1,341)	1:A:127:LEU:HB2	1:A:129:GLY:H	14	0.04
(1,33)	1:A:110:GLU:O	1:A:114:ASP:H	1	0.04
(1,33)	1:A:110:GLU:O	1:A:114:ASP:H	2	0.04
(1,33)	1:A:110:GLU:O	1:A:114:ASP:H	14	0.04
(1,320)	1:A:145:ASP:H	1:A:146:GLN:H	11	0.04
(1,318)	1:A:129:GLY:H	1:A:130:GLU:H	16	0.04
(1,292)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:LEU:H	16	0.04
(1,29)	1:A:19:ALA:O	1:A:90:GLY:H	4	0.04
(1,273)	1:A:142:THR:H	1:A:142:THR:HB	12	0.04
(1,27)	1:A:21:LEU:O	1:A:88:VAL:H	2	0.04
(1,27)	1:A:21:LEU:O	1:A:88:VAL:H	18	0.04
(1,266)	1:A:125:PHE:H	1:A:125:PHE:HB3	8	0.04
(1,25)	1:A:20:LEU:O	1:A:75:PHE:H	15	0.04
(1,25)	1:A:20:LEU:O	1:A:75:PHE:H	18	0.04
(1,248)	1:A:101:LEU:H	1:A:101:LEU:HB2	9	0.04
(1,248)	1:A:101:LEU:H	1:A:101:LEU:HB2	11	0.04
(1,248)	1:A:101:LEU:H	1:A:101:LEU:HB2	20	0.04
(1,229)	1:A:31:LEU:H	1:A:31:LEU:HB3	6	0.04
(1,216)	1:A:159:LEU:H	1:A:160:GLU:H	12	0.04
(1,202)	1:A:142:THR:HA	1:A:143:ALA:H	16	0.04
(1,202)	1:A:142:THR:HA	1:A:143:ALA:H	20	0.04
(1,173)	1:A:114:ASP:HB2	1:A:115:ALA:H	10	0.04
(1,17)	1:A:60:ARG:H	1:A:72:GLU:O	17	0.04
(1,13)	1:A:58:PHE:H	1:A:74:GLY:O	2	0.04
(1,13)	1:A:58:PHE:H	1:A:74:GLY:O	6	0.04
(1,13)	1:A:58:PHE:H	1:A:74:GLY:O	15	0.04
(1,13)	1:A:58:PHE:H	1:A:74:GLY:O	16	0.04
(1,123)	1:A:69:PHE:HB2	1:A:70:GLU:H	18	0.04
(1,1204)	1:A:153:LEU:H	1:A:153:LEU:HB2	1	0.04
(1,1204)	1:A:153:LEU:H	1:A:153:LEU:HB2	17	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1201)	1:A:146:GLN:H	1:A:146:GLN:HB2	18	0.04
(1,120)	1:A:68:THR:HB	1:A:69:PHE:H	14	0.04
(1,1153)	1:A:96:LYS:HB2	1:A:97:ALA:H	2	0.04
(1,1115)	1:A:51:LYS:HB2	1:A:52:SER:H	2	0.04
(1,1115)	1:A:51:LYS:HB2	1:A:52:SER:H	14	0.04
(1,111)	1:A:51:LYS:HB3	1:A:52:SER:H	8	0.04
(1,111)	1:A:51:LYS:HB3	1:A:52:SER:H	13	0.04
(1,1109)	1:A:49:GLN:HE21	1:A:82:GLU:HB2	18	0.04
(1,1094)	1:A:40:HIS:HB2	1:A:41:ASP:H	19	0.04
(1,1031)	1:A:12:LYS:HB2	1:A:13:GLU:H	6	0.04
(1,1031)	1:A:12:LYS:HB2	1:A:13:GLU:H	10	0.04
(1,1013)	1:A:6:GLN:HB2	1:A:7:PHE:H	9	0.04
(1,9)	1:A:26:THR:H	1:A:69:PHE:O	10	0.03
(1,7)	1:A:24:THR:H	1:A:71:VAL:O	6	0.03
(1,665)	1:A:131:ALA:HA	1:A:153:LEU:HB3	2	0.03
(1,663)	1:A:120:VAL:HA	1:A:125:PHE:HB3	10	0.03
(1,657)	1:A:45:LEU:HB3	1:A:84:SER:HB3	4	0.03
(1,657)	1:A:45:LEU:HB3	1:A:84:SER:HB3	12	0.03
(1,63)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:12:LYS:H	4	0.03
(1,63)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:12:LYS:H	13	0.03
(1,612)	1:A:96:LYS:HG3	1:A:97:ALA:H	6	0.03
(1,60)	1:A:10:GLU:HB2	1:A:11:LEU:H	19	0.03
(1,556)	1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HE3	8	0.03
(1,517)	1:A:28:MET:HA	1:A:30:GLU:H	7	0.03
(1,5)	1:A:21:LEU:H	1:A:88:VAL:O	10	0.03
(1,493)	1:A:82:GLU:HB2	1:A:83:GLY:H	8	0.03
(1,492)	1:A:81:VAL:HB	1:A:82:GLU:H	16	0.03
(1,488)	1:A:69:PHE:HB3	1:A:70:GLU:H	19	0.03
(1,473)	1:A:103:ILE:H	1:A:103:ILE:HB	20	0.03
(1,43)	1:A:98:ALA:O	1:A:153:LEU:H	9	0.03
(1,43)	1:A:98:ALA:O	1:A:153:LEU:H	10	0.03
(1,43)	1:A:98:ALA:O	1:A:153:LEU:H	12	0.03
(1,420)	1:A:119:TRP:HE1	1:A:123:ASN:HD22	4	0.03
(1,420)	1:A:119:TRP:HE1	1:A:123:ASN:HD22	12	0.03
(1,420)	1:A:119:TRP:HE1	1:A:123:ASN:HD22	18	0.03
(1,41)	1:A:57:PRO:O	1:A:135:TYR:H	1	0.03
(1,41)	1:A:57:PRO:O	1:A:135:TYR:H	18	0.03
(1,386)	1:A:144:PRO:HD2	1:A:145:ASP:H	13	0.03
(1,377)	1:A:96:LYS:HD2	1:A:97:ALA:H	20	0.03
(1,372)	1:A:51:LYS:HD3	1:A:52:SER:H	18	0.03
(1,371)	1:A:51:LYS:HD2	1:A:52:SER:H	5	0.03
(1,371)	1:A:51:LYS:HD2	1:A:52:SER:H	12	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,37)	1:A:132:TYR:H	1:A:152:SER:O	16	0.03
(1,360)	1:A:84:SER:H	1:A:87:VAL:H	20	0.03
(1,36)	1:A:61:TYR:O	1:A:131:ALA:N	8	0.03
(1,36)	1:A:61:TYR:O	1:A:131:ALA:N	17	0.03
(1,351)	1:A:10:GLU:H	1:A:99:SER:H	7	0.03
(1,35)	1:A:61:TYR:O	1:A:131:ALA:H	3	0.03
(1,341)	1:A:127:LEU:HB2	1:A:129:GLY:H	10	0.03
(1,331)	1:A:53:PRO:HB3	1:A:55:GLY:H	8	0.03
(1,331)	1:A:53:PRO:HB3	1:A:55:GLY:H	20	0.03
(1,33)	1:A:110:GLU:O	1:A:114:ASP:H	4	0.03
(1,33)	1:A:110:GLU:O	1:A:114:ASP:H	10	0.03
(1,324)	1:A:27:ALA:H	1:A:30:GLU:HB3	19	0.03
(1,322)	1:A:149:THR:H	1:A:150:ARG:H	2	0.03
(1,322)	1:A:149:THR:H	1:A:150:ARG:H	15	0.03
(1,3)	1:A:19:ALA:H	1:A:90:GLY:O	7	0.03
(1,29)	1:A:19:ALA:O	1:A:90:GLY:H	9	0.03
(1,288)	1:A:13:GLU:H	1:A:14:LEU:H	8	0.03
(1,288)	1:A:13:GLU:H	1:A:14:LEU:H	10	0.03
(1,286)	1:A:6:GLN:H	1:A:7:PHE:H	20	0.03
(1,26)	1:A:20:LEU:O	1:A:75:PHE:N	10	0.03
(1,257)	1:A:118:LYS:H	1:A:118:LYS:HB3	5	0.03
(1,25)	1:A:20:LEU:O	1:A:75:PHE:H	4	0.03
(1,25)	1:A:20:LEU:O	1:A:75:PHE:H	5	0.03
(1,25)	1:A:20:LEU:O	1:A:75:PHE:H	6	0.03
(1,25)	1:A:20:LEU:O	1:A:75:PHE:H	11	0.03
(1,25)	1:A:20:LEU:O	1:A:75:PHE:H	12	0.03
(1,25)	1:A:20:LEU:O	1:A:75:PHE:H	13	0.03
(1,25)	1:A:20:LEU:O	1:A:75:PHE:H	14	0.03
(1,25)	1:A:20:LEU:O	1:A:75:PHE:H	16	0.03
(1,249)	1:A:101:LEU:H	1:A:101:LEU:HB3	17	0.03
(1,23)	1:A:60:ARG:O	1:A:72:GLU:H	9	0.03
(1,21)	1:A:62:PHE:O	1:A:70:GLU:H	3	0.03
(1,21)	1:A:62:PHE:O	1:A:70:GLU:H	17	0.03
(1,199)	1:A:140:ALA:H	1:A:141:GLU:H	13	0.03
(1,199)	1:A:140:ALA:H	1:A:141:GLU:H	19	0.03
(1,184)	1:A:125:PHE:HB2	1:A:126:ASP:H	4	0.03
(1,184)	1:A:125:PHE:HB2	1:A:126:ASP:H	8	0.03
(1,17)	1:A:60:ARG:H	1:A:72:GLU:O	1	0.03
(1,17)	1:A:60:ARG:H	1:A:72:GLU:O	7	0.03
(1,143)	1:A:89:THR:HB	1:A:90:GLY:H	1	0.03
(1,143)	1:A:89:THR:HB	1:A:90:GLY:H	18	0.03
(1,141)	1:A:88:VAL:HB	1:A:89:THR:H	17	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,120)	1:A:68:THR:HB	1:A:69:PHE:H	1	0.03
(1,120)	1:A:68:THR:HB	1:A:69:PHE:H	3	0.03
(1,120)	1:A:68:THR:HB	1:A:69:PHE:H	7	0.03
(1,120)	1:A:68:THR:HB	1:A:69:PHE:H	10	0.03
(1,120)	1:A:68:THR:HB	1:A:69:PHE:H	17	0.03
(1,120)	1:A:68:THR:HB	1:A:69:PHE:H	20	0.03
(1,1173)	1:A:114:ASP:HB2	1:A:115:ALA:H	5	0.03
(1,1128)	1:A:53:PRO:HD2	1:A:54:SER:H	15	0.03
(1,11)	1:A:43:LEU:O	1:A:47:ALA:H	1	0.03
(1,1094)	1:A:40:HIS:HB2	1:A:41:ASP:H	13	0.03
(1,1031)	1:A:12:LYS:HB2	1:A:13:GLU:H	4	0.03
(1,1018)	1:A:9:CYS:HB2	1:A:10:GLU:H	13	0.03
(1,10)	1:A:26:THR:N	1:A:69:PHE:O	9	0.03
(1,927)	1:A:132:TYR:HE1	1:A:134:ILE:HD11	1	0.02
(1,927)	1:A:132:TYR:HE1	1:A:134:ILE:HD12	1	0.02
(1,927)	1:A:132:TYR:HE1	1:A:134:ILE:HD13	1	0.02
(1,9)	1:A:26:THR:H	1:A:69:PHE:O	6	0.02
(1,8)	1:A:24:THR:N	1:A:71:VAL:O	5	0.02
(1,8)	1:A:24:THR:N	1:A:71:VAL:O	11	0.02
(1,74)	1:A:18:PRO:HB3	1:A:19:ALA:H	11	0.02
(1,7)	1:A:24:THR:H	1:A:71:VAL:O	3	0.02
(1,7)	1:A:24:THR:H	1:A:71:VAL:O	12	0.02
(1,7)	1:A:24:THR:H	1:A:71:VAL:O	13	0.02
(1,666)	1:A:131:ALA:HA	1:A:153:LEU:HB2	11	0.02
(1,664)	1:A:134:ILE:HB	1:A:149:THR:HA	6	0.02
(1,664)	1:A:134:ILE:HB	1:A:149:THR:HA	14	0.02
(1,663)	1:A:120:VAL:HA	1:A:125:PHE:HB3	2	0.02
(1,657)	1:A:45:LEU:HB3	1:A:84:SER:HB3	18	0.02
(1,633)	1:A:102:TYR:HA	1:A:149:THR:HB	19	0.02
(1,632)	1:A:125:PHE:HB3	1:A:155:LEU:HG	12	0.02
(1,612)	1:A:96:LYS:HG3	1:A:97:ALA:H	2	0.02
(1,60)	1:A:10:GLU:HB2	1:A:11:LEU:H	15	0.02
(1,6)	1:A:21:LEU:N	1:A:88:VAL:O	10	0.02
(1,598)	1:A:23:ARG:HG3	1:A:24:THR:H	2	0.02
(1,556)	1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HE3	4	0.02
(1,551)	1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HD2	8	0.02
(1,551)	1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HD2	19	0.02
(1,525)	1:A:31:LEU:HA	1:A:34:LEU:HB2	10	0.02
(1,504)	1:A:144:PRO:HB3	1:A:145:ASP:H	2	0.02
(1,5)	1:A:21:LEU:H	1:A:88:VAL:O	3	0.02
(1,491)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:79:GLY:H	10	0.02
(1,47)	1:A:4:GLU:HA	1:A:5:CYS:H	1	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,44)	1:A:98:ALA:O	1:A:153:LEU:N	4	0.02
(1,43)	1:A:98:ALA:O	1:A:153:LEU:H	3	0.02
(1,43)	1:A:98:ALA:O	1:A:153:LEU:H	8	0.02
(1,42)	1:A:57:PRO:O	1:A:135:TYR:N	14	0.02
(1,42)	1:A:57:PRO:O	1:A:135:TYR:N	17	0.02
(1,41)	1:A:57:PRO:O	1:A:135:TYR:H	2	0.02
(1,41)	1:A:57:PRO:O	1:A:135:TYR:H	3	0.02
(1,41)	1:A:57:PRO:O	1:A:135:TYR:H	5	0.02
(1,41)	1:A:57:PRO:O	1:A:135:TYR:H	6	0.02
(1,39)	1:A:59:ALA:O	1:A:133:GLU:H	7	0.02
(1,388)	1:A:150:ARG:HG2	1:A:151:VAL:H	15	0.02
(1,374)	1:A:53:PRO:HG3	1:A:54:SER:H	17	0.02
(1,374)	1:A:53:PRO:HG3	1:A:54:SER:H	20	0.02
(1,373)	1:A:53:PRO:HG2	1:A:54:SER:H	12	0.02
(1,36)	1:A:61:TYR:O	1:A:131:ALA:N	2	0.02
(1,36)	1:A:61:TYR:O	1:A:131:ALA:N	5	0.02
(1,36)	1:A:61:TYR:O	1:A:131:ALA:N	12	0.02
(1,36)	1:A:61:TYR:O	1:A:131:ALA:N	16	0.02
(1,357)	1:A:49:GLN:H	1:A:51:LYS:H	13	0.02
(1,355)	1:A:140:ALA:H	1:A:142:THR:H	20	0.02
(1,35)	1:A:61:TYR:O	1:A:131:ALA:H	20	0.02
(1,342)	1:A:127:LEU:HB3	1:A:129:GLY:H	3	0.02
(1,342)	1:A:127:LEU:HB3	1:A:129:GLY:H	10	0.02
(1,33)	1:A:110:GLU:O	1:A:114:ASP:H	8	0.02
(1,33)	1:A:110:GLU:O	1:A:114:ASP:H	12	0.02
(1,33)	1:A:110:GLU:O	1:A:114:ASP:H	16	0.02
(1,328)	1:A:47:ALA:HA	1:A:51:LYS:H	1	0.02
(1,327)	1:A:44:GLN:HA	1:A:47:ALA:H	2	0.02
(1,325)	1:A:31:LEU:HA	1:A:34:LEU:H	5	0.02
(1,321)	1:A:146:GLN:H	1:A:147:LEU:H	19	0.02
(1,318)	1:A:129:GLY:H	1:A:130:GLU:H	10	0.02
(1,318)	1:A:129:GLY:H	1:A:130:GLU:H	12	0.02
(1,292)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:LEU:H	13	0.02
(1,29)	1:A:19:ALA:O	1:A:90:GLY:H	14	0.02
(1,285)	1:A:160:GLU:H	1:A:160:GLU:HA	13	0.02
(1,28)	1:A:21:LEU:O	1:A:88:VAL:N	2	0.02
(1,27)	1:A:21:LEU:O	1:A:88:VAL:H	5	0.02
(1,27)	1:A:21:LEU:O	1:A:88:VAL:H	6	0.02
(1,27)	1:A:21:LEU:O	1:A:88:VAL:H	19	0.02
(1,267)	1:A:127:LEU:H	1:A:127:LEU:HB2	5	0.02
(1,25)	1:A:20:LEU:O	1:A:75:PHE:H	8	0.02
(1,243)	1:A:64:MET:H	1:A:64:MET:HB3	6	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,23)	1:A:60:ARG:O	1:A:72:GLU:H	3	0.02
(1,23)	1:A:60:ARG:O	1:A:72:GLU:H	5	0.02
(1,23)	1:A:60:ARG:O	1:A:72:GLU:H	6	0.02
(1,23)	1:A:60:ARG:O	1:A:72:GLU:H	19	0.02
(1,22)	1:A:62:PHE:O	1:A:70:GLU:N	1	0.02
(1,22)	1:A:62:PHE:O	1:A:70:GLU:N	2	0.02
(1,22)	1:A:62:PHE:O	1:A:70:GLU:N	8	0.02
(1,22)	1:A:62:PHE:O	1:A:70:GLU:N	10	0.02
(1,216)	1:A:159:LEU:H	1:A:160:GLU:H	7	0.02
(1,214)	1:A:155:LEU:HB3	1:A:156:HIS:H	12	0.02
(1,21)	1:A:62:PHE:O	1:A:70:GLU:H	7	0.02
(1,201)	1:A:141:GLU:HB3	1:A:142:THR:H	12	0.02
(1,199)	1:A:140:ALA:H	1:A:141:GLU:H	17	0.02
(1,198)	1:A:139:PRO:HB3	1:A:140:ALA:H	19	0.02
(1,19)	1:A:61:TYR:H	1:A:131:ALA:O	14	0.02
(1,184)	1:A:125:PHE:HB2	1:A:126:ASP:H	10	0.02
(1,17)	1:A:60:ARG:H	1:A:72:GLU:O	6	0.02
(1,17)	1:A:60:ARG:H	1:A:72:GLU:O	11	0.02
(1,17)	1:A:60:ARG:H	1:A:72:GLU:O	15	0.02
(1,17)	1:A:60:ARG:H	1:A:72:GLU:O	19	0.02
(1,15)	1:A:59:ALA:H	1:A:133:GLU:O	3	0.02
(1,15)	1:A:59:ALA:H	1:A:133:GLU:O	7	0.02
(1,15)	1:A:59:ALA:H	1:A:133:GLU:O	9	0.02
(1,15)	1:A:59:ALA:H	1:A:133:GLU:O	15	0.02
(1,15)	1:A:59:ALA:H	1:A:133:GLU:O	18	0.02
(1,15)	1:A:59:ALA:H	1:A:133:GLU:O	20	0.02
(1,14)	1:A:58:PHE:N	1:A:74:GLY:O	15	0.02
(1,135)	1:A:82:GLU:H	1:A:83:GLY:H	20	0.02
(1,13)	1:A:58:PHE:H	1:A:74:GLY:O	1	0.02
(1,13)	1:A:58:PHE:H	1:A:74:GLY:O	19	0.02
(1,1204)	1:A:153:LEU:H	1:A:153:LEU:HB2	13	0.02
(1,120)	1:A:68:THR:HB	1:A:69:PHE:H	6	0.02
(1,1181)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:122:ASP:H	7	0.02
(1,1143)	1:A:82:GLU:HB2	1:A:83:GLY:H	10	0.02
(1,1115)	1:A:51:LYS:HB2	1:A:52:SER:H	6	0.02
(1,11)	1:A:43:LEU:O	1:A:47:ALA:H	7	0.02
(1,1013)	1:A:6:GLN:HB2	1:A:7:PHE:H	16	0.02
(1,94)	1:A:31:LEU:HB3	1:A:32:GLY:H	4	0.01
(1,9)	1:A:26:THR:H	1:A:69:PHE:O	3	0.01
(1,8)	1:A:24:THR:N	1:A:71:VAL:O	9	0.01
(1,666)	1:A:131:ALA:HA	1:A:153:LEU:HB2	18	0.01
(1,657)	1:A:45:LEU:HB3	1:A:84:SER:HB3	11	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,63)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:12:LYS:H	6	0.01
(1,63)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:12:LYS:H	16	0.01
(1,597)	1:A:23:ARG:HG2	1:A:24:THR:H	12	0.01
(1,570)	1:A:96:LYS:HB2	1:A:96:LYS:HE2	13	0.01
(1,566)	1:A:96:LYS:HA	1:A:96:LYS:HD2	3	0.01
(1,557)	1:A:51:LYS:HB2	1:A:51:LYS:HE3	9	0.01
(1,556)	1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HE3	12	0.01
(1,551)	1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HD2	4	0.01
(1,509)	1:A:118:LYS:HA	1:A:121:ASP:HB2	3	0.01
(1,50)	1:A:6:GLN:HB3	1:A:7:PHE:H	11	0.01
(1,5)	1:A:21:LEU:H	1:A:88:VAL:O	19	0.01
(1,491)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:79:GLY:H	1	0.01
(1,49)	1:A:6:GLN:HB2	1:A:7:PHE:H	15	0.01
(1,46)	1:A:3:PHE:HA	1:A:4:GLU:H	4	0.01
(1,44)	1:A:98:ALA:O	1:A:153:LEU:N	5	0.01
(1,44)	1:A:98:ALA:O	1:A:153:LEU:N	10	0.01
(1,43)	1:A:98:ALA:O	1:A:153:LEU:H	2	0.01
(1,43)	1:A:98:ALA:O	1:A:153:LEU:H	6	0.01
(1,43)	1:A:98:ALA:O	1:A:153:LEU:H	7	0.01
(1,420)	1:A:119:TRP:HE1	1:A:123:ASN:HD22	17	0.01
(1,42)	1:A:57:PRO:O	1:A:135:TYR:N	9	0.01
(1,42)	1:A:57:PRO:O	1:A:135:TYR:N	15	0.01
(1,41)	1:A:57:PRO:O	1:A:135:TYR:H	20	0.01
(1,4)	1:A:19:ALA:N	1:A:90:GLY:O	7	0.01
(1,387)	1:A:144:PRO:HD3	1:A:145:ASP:H	7	0.01
(1,387)	1:A:144:PRO:HD3	1:A:145:ASP:H	10	0.01
(1,387)	1:A:144:PRO:HD3	1:A:145:ASP:H	16	0.01
(1,386)	1:A:144:PRO:HD2	1:A:145:ASP:H	12	0.01
(1,378)	1:A:96:LYS:HD3	1:A:97:ALA:H	10	0.01
(1,378)	1:A:96:LYS:HD3	1:A:97:ALA:H	15	0.01
(1,373)	1:A:53:PRO:HG2	1:A:54:SER:H	1	0.01
(1,373)	1:A:53:PRO:HG2	1:A:54:SER:H	9	0.01
(1,371)	1:A:51:LYS:HD2	1:A:52:SER:H	20	0.01
(1,37)	1:A:132:TYR:H	1:A:152:SER:O	7	0.01
(1,36)	1:A:61:TYR:O	1:A:131:ALA:N	19	0.01
(1,357)	1:A:49:GLN:H	1:A:51:LYS:H	18	0.01
(1,355)	1:A:140:ALA:H	1:A:142:THR:H	3	0.01
(1,351)	1:A:10:GLU:H	1:A:99:SER:H	10	0.01
(1,35)	1:A:61:TYR:O	1:A:131:ALA:H	1	0.01
(1,35)	1:A:61:TYR:O	1:A:131:ALA:H	4	0.01
(1,35)	1:A:61:TYR:O	1:A:131:ALA:H	11	0.01
(1,346)	1:A:26:THR:H	1:A:69:PHE:H	5	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,343)	1:A:97:ALA:HA	1:A:155:LEU:H	3	0.01
(1,343)	1:A:97:ALA:HA	1:A:155:LEU:H	5	0.01
(1,342)	1:A:127:LEU:HB3	1:A:129:GLY:H	4	0.01
(1,342)	1:A:127:LEU:HB3	1:A:129:GLY:H	20	0.01
(1,34)	1:A:110:GLU:O	1:A:114:ASP:N	1	0.01
(1,33)	1:A:110:GLU:O	1:A:114:ASP:H	3	0.01
(1,33)	1:A:110:GLU:O	1:A:114:ASP:H	5	0.01
(1,33)	1:A:110:GLU:O	1:A:114:ASP:H	7	0.01
(1,33)	1:A:110:GLU:O	1:A:114:ASP:H	17	0.01
(1,328)	1:A:47:ALA:HA	1:A:51:LYS:H	6	0.01
(1,327)	1:A:44:GLN:HA	1:A:47:ALA:H	5	0.01
(1,327)	1:A:44:GLN:HA	1:A:47:ALA:H	20	0.01
(1,324)	1:A:27:ALA:H	1:A:30:GLU:HB3	13	0.01
(1,323)	1:A:27:ALA:H	1:A:30:GLU:HB2	11	0.01
(1,319)	1:A:141:GLU:H	1:A:142:THR:H	20	0.01
(1,31)	1:A:12:LYS:O	1:A:97:ALA:H	7	0.01
(1,3)	1:A:19:ALA:H	1:A:90:GLY:O	15	0.01
(1,29)	1:A:19:ALA:O	1:A:90:GLY:H	3	0.01
(1,29)	1:A:19:ALA:O	1:A:90:GLY:H	12	0.01
(1,29)	1:A:19:ALA:O	1:A:90:GLY:H	19	0.01
(1,288)	1:A:13:GLU:H	1:A:14:LEU:H	1	0.01
(1,288)	1:A:13:GLU:H	1:A:14:LEU:H	11	0.01
(1,288)	1:A:13:GLU:H	1:A:14:LEU:H	12	0.01
(1,285)	1:A:160:GLU:H	1:A:160:GLU:HA	2	0.01
(1,285)	1:A:160:GLU:H	1:A:160:GLU:HA	4	0.01
(1,28)	1:A:21:LEU:O	1:A:88:VAL:N	12	0.01
(1,273)	1:A:142:THR:H	1:A:142:THR:HB	6	0.01
(1,27)	1:A:21:LEU:O	1:A:88:VAL:H	4	0.01
(1,27)	1:A:21:LEU:O	1:A:88:VAL:H	10	0.01
(1,27)	1:A:21:LEU:O	1:A:88:VAL:H	14	0.01
(1,27)	1:A:21:LEU:O	1:A:88:VAL:H	15	0.01
(1,27)	1:A:21:LEU:O	1:A:88:VAL:H	16	0.01
(1,26)	1:A:20:LEU:O	1:A:75:PHE:N	18	0.01
(1,251)	1:A:110:GLU:H	1:A:110:GLU:HB2	4	0.01
(1,25)	1:A:20:LEU:O	1:A:75:PHE:H	7	0.01
(1,25)	1:A:20:LEU:O	1:A:75:PHE:H	17	0.01
(1,248)	1:A:101:LEU:H	1:A:101:LEU:HB2	14	0.01
(1,243)	1:A:64:MET:H	1:A:64:MET:HB3	3	0.01
(1,243)	1:A:64:MET:H	1:A:64:MET:HB3 17		0.01
(1,23)	1:A:60:ARG:O	1:A:72:GLU:H	15	0.01
(1,229)	1:A:31:LEU:H	1:A:31:LEU:HB3	13	0.01
(1,220)	1:A:7:PHE:H	1:A:7:PHE:HB2	10	0.01



Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,22)	1:A:62:PHE:O	1:A:70:GLU:N	18	0.01
(1,213)	1:A:155:LEU:HB2	1:A:156:HIS:H	1	0.01
(1,21)	1:A:62:PHE:O	1:A:70:GLU:H	4	0.01
(1,21)	1:A:62:PHE:O	1:A:70:GLU:H	5	0.01
(1,21)	1:A:62:PHE:O	1:A:70:GLU:H	9	0.01
(1,21)	1:A:62:PHE:O	1:A:70:GLU:H	12	0.01
(1,202)	1:A:142:THR:HA	1:A:143:ALA:H	5	0.01
(1,198)	1:A:139:PRO:HB3	1:A:140:ALA:H	10	0.01
(1,198)	1:A:139:PRO:HB3	1:A:140:ALA:H	12	0.01
(1,19)	1:A:61:TYR:H	1:A:131:ALA:O	1	0.01
(1,184)	1:A:125:PHE:HB2	1:A:126:ASP:H	14	0.01
(1,17)	1:A:60:ARG:H	1:A:72:GLU:O	5	0.01
(1,17)	1:A:60:ARG:H	1:A:72:GLU:O	10	0.01
(1,150)	1:A:93:PRO:HB3	1:A:94:SER:H	9	0.01
(1,15)	1:A:59:ALA:H	1:A:133:GLU:O	16	0.01
(1,149)	1:A:93:PRO:HB2	1:A:94:SER:H	18	0.01
(1,143)	1:A:89:THR:HB	1:A:90:GLY:H	20	0.01
(1,135)	1:A:82:GLU:H	1:A:83:GLY:H	17	0.01
(1,13)	1:A:58:PHE:H	1:A:74:GLY:O	5	0.01
(1,13)	1:A:58:PHE:H	1:A:74:GLY:O	10	0.01
(1,13)	1:A:58:PHE:H	1:A:74:GLY:O	13	0.01
(1,123)	1:A:69:PHE:HB2	1:A:70:GLU:H	6	0.01
(1,123)	1:A:69:PHE:HB2	1:A:70:GLU:H	8	0.01
(1,123)	1:A:69:PHE:HB2	1:A:70:GLU:H	19	0.01
(1,1200)	1:A:145:ASP:H	1:A:145:ASP:HB2	1	0.01
(1,120)	1:A:68:THR:HB	1:A:69:PHE:H	19	0.01
(1,1181)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:122:ASP:H	19	0.01
(1,114)	1:A:54:SER:H	1:A:55:GLY:H	7	0.01
(1,1138)	1:A:70:GLU:HG2	1:A:71:VAL:HA	4	0.01
(1,1115)	1:A:51:LYS:HB2	1:A:52:SER:H	11	0.01
(1,110)	1:A:51:LYS:HB2	1:A:52:SER:H	7	0.01
(1,110)	1:A:51:LYS:HB2	1:A:52:SER:H	12	0.01
(1,110)	1:A:51:LYS:HB2	1:A:52:SER:H	15	0.01
(1,110)	1:A:51:LYS:HB2	1:A:52:SER:H	17	0.01
(1,11)	1:A:43:LEU:O	1:A:47:ALA:H	3	0.01
(1,11)	1:A:43:LEU:O	1:A:47:ALA:H	12	0.01
(1,1097)	1:A:45:LEU:HB3	1:A:84:SER:HB2	13	0.01
(1,10)	1:A:26:THR:N	1:A:69:PHE:O	20	0.01
(1,1)	1:A:14:LEU:H	1:A:95:GLY:O	17	0.01
(1,1)	1:A:14:LEU:H	1:A:95:GLY:O	19	0.01



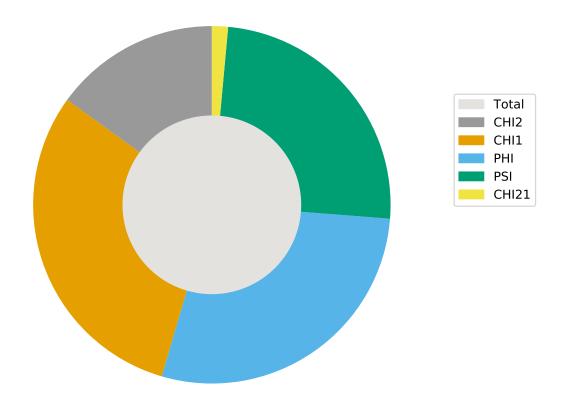
9 Dihedral angle restraints analysis

9.1 Dihedral angle restraints summary

Angle name	Count	%
CHI2	103	15.0
CHI1	209	30.5
PHI	194	28.3
PSI	170	24.8
CHI21	10	1.5
Total	686	100.0

9.1.1 Pie chart : Dihedral angle restraints

There are 0 unmapped restraints



9.2 Dihedral angle violations

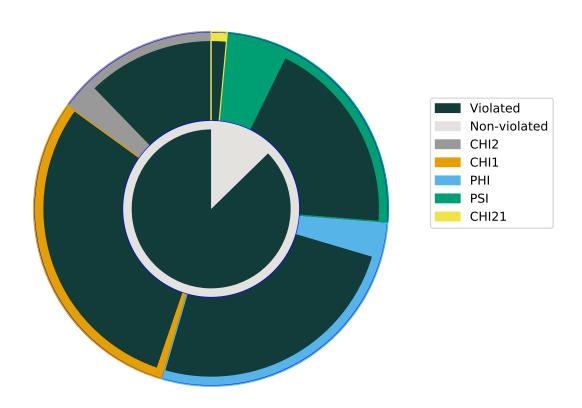
The following table provides the summary of violated restraints. Restraints that are violated at least in one model are counted as violated.



Angle name	Count	$\%^{1}$	$\%^2$
CHI2	84	81.6	14.0
CHI1	204	97.6	34.1
PHI	171	88.1	28.5
PSI	130	76.5	21.7
CHI21	10	100.0	1.7
Total	599	87.3	100.0

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

9.2.1 Pie chart: Dihedral angle violations



9.3 Consistent dihedral angle violations

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

Angle name	Count	$\%^1$	$\%^2$
CHI2	81	78.6	19.1

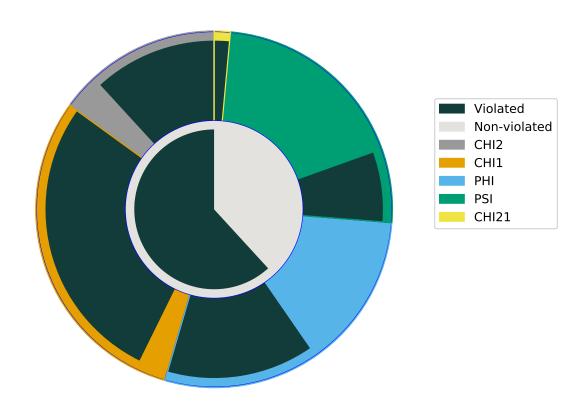
Continued on next page...



Angle name	Count	$\%^1$	$\%^2$
CHI1	190	90.9	44.8
PHI	97	50.0	22.9
PSI	46	27.1	10.8
CHI21	10	100.0	2.4
Total	424	61.8	100.0

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

9.3.1 Pie chart : Consistent dihedral angle violations



9.4 Residual dihedral angle violations

Violation are counted in different bin sizes and listed below

Range (\circ)	No. of violated restraints per model	$ \text{Max violation } (\circ) $
0.0-5.0	33.5	5.0
5.0-10.0	9.6	10.0



Range (\circ)	No. of violated restraints per model	$\mathbf{Max\ violation}\ (\ \circ\)$
10.0-20.0	41.5	20.0
20.0-40.0	127.7	40.0
40.0-80.0	116.3	79.95
80.0<	168.3	174.78

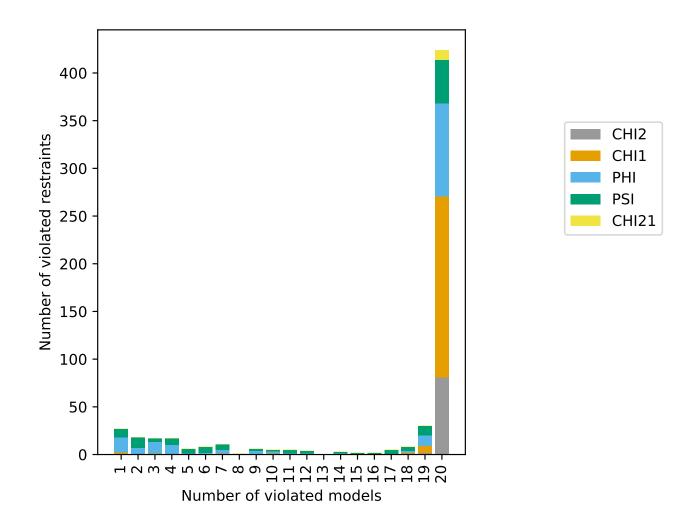
9.5 Dihedral angle violations in the ensemble

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

	No. of violated restraints			No. of violated models		
CHI2	CHI1	PHI	PSI	CHI21	Total	No. of violated models
0	2	16	9	0	27	1
0	0	7	11	0	18	2
0	1	12	4	0	17	3
0	0	10	7	0	17	4
0	0	1	5	0	6	5
0	0	2	6	0	8	6
0	1	4	6	0	11	7
0	0	1	0	0	1	8
0	0	4	2	0	6	9
0	1	2	2	0	5	10
0	0	1	4	0	5	11
0	0	1	3	0	4	12
0	0	0	0	0	0	13
0	1	0	2	0	3	14
0	0	0	2	0	2	15
0	0	0	2	0	2	16
0	0	0	5	0	5	17
1	1	2	4	0	8	18
2	7	11	10	0	30	19
81	190	97	46	10	424	20



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



9.6 Violations in each model

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

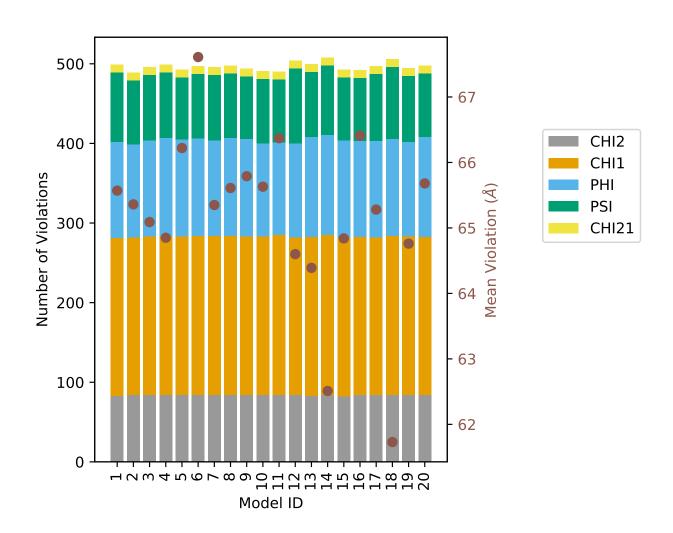
Model ID		No	o. of v	^r iolati	ons		Mean (Å)	Max (Å)
Model 1D	CHI2	CHI1	PHI	PSI	CHI21	Total	Mean (A)	Max (A)
1	83	198	121	87	10	499	65.57	173.69
2	84	198	117	80	10	489	65.36	164.58
3	84	199	121	82	10	496	65.09	170.25
4	84	200	123	82	10	499	64.85	173.71
5	84	199	122	78	10	493	66.22	172.58
6	84	200	122	81	10	497	67.61	173.05
7	84	200	120	82	10	496	65.35	174.78
8	84	200	123	81	10	498	65.61	173.37
9	84	199	123	78	10	494	65.79	168.94



Continued from previous page...

Model ID		No	o. of v	violati	ons		Mean (Å)	Max (Å)
Wiodei 1D	CHI2	CHI1	PHI	PSI	CHI21	Total	Mean (A)	Max (A)
10	84	199	117	81	10	491	65.63	173.69
11	84	201	116	79	10	490	66.37	170.46
12	84	198	118	94	10	504	64.6	171.46
13	83	200	125	82	10	500	64.39	170.88
14	84	201	126	87	10	508	62.51	166.81
15	82	200	122	79	10	493	64.84	163.73
16	84	199	120	79	10	492	66.41	174.2
17	84	198	121	84	10	497	65.28	171.05
18	84	200	122	90	10	506	61.73	173.14
19	84	199	119	83	10	495	64.76	169.86
20	84	199	125	80	10	498	65.68	164.42

9.6.1 Bar graph: Violations in each model

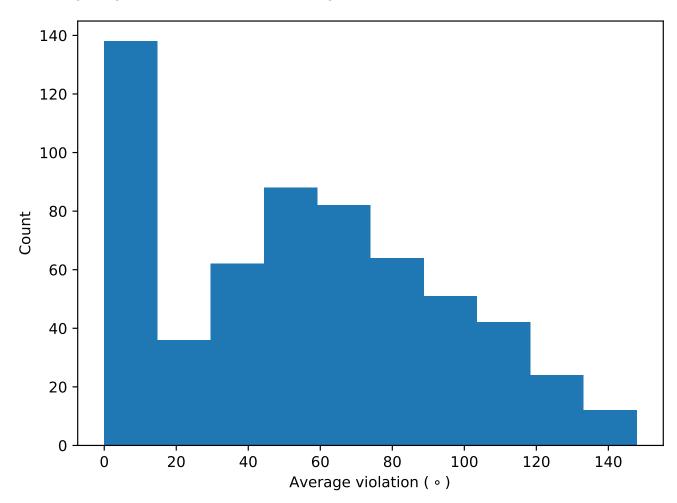




9.7 Most violated dihedral angle restraints

9.7.1 Histogram: Distribution of mean dihedral angle violations

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



9.7.2 Table: Most violated dihedral angle restraints

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean (o)	Max (
(1,596)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	18	48.91	140.35
(1,190)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	20	74.13	136.78
(1,467)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	20	105.44	134.98
(1,515)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	20	110.98	134.1
(1,388)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	20	72.91	133.92
(1,179)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	20	64.28	131.85
(1,673)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	20	68.78	130.85
(1,468)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	20	84.56	130.61
(1,678)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	20	63.38	130.02
(1,644)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	1:A:148:ARG:N	20	92.05	129.99



Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean (o)	Max (
(1,394)	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	20	56.77	129.27
(1,672)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	18	68.11	127.43
(1,449)	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	20	86.83	127.1
(1,305)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	19	61.57	127.0
(1,268)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	17	71.7	123.98
(1,168)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	20	73.2	123.96
(1,503)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	20	91.58	119.98
(1,500)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	20	95.56	119.64
(1,445)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	20	82.38	118.15
(1,361)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	20	108.31	117.72
(1,391)	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	20	67.85	117.58
(1,172)	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	17	37.12	117.48
(1,185)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	19	60.69	117.12
(1,665)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	20	75.58	115.29
(1,589)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	20	83.55	113.08
(1,621)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	20	46.8	112.04
(1,320)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	20	60.83	111.19
(1,684)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	17	64.88	111.16
(1,431)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	20	91.05	110.29
(1,313)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	20	70.86	107.11
(1,413)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:PHE:N	20	81.63	106.63
(1,197)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	19	64.09	98.31
(1,365)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	20	84.5	98.26
(1,600)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	20	44.53	97.36
(1,204)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	1:A:8:VAL:N	20	62.33	90.75
(1,444)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	20	47.62	86.4
(1,504)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	19	36.88	84.63
(1,485)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	20	55.68	81.04
(1,214)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	20	53.21	76.4
(1,626)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	20	19.65	70.39
(1,627)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	19	45.13	69.6
(1,423)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	20	50.46	64.68
(1,484)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	20	44.32	64.2
(1,231)	1:A:16:PRO:N	1:A:16:PRO:CA	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	20	42.6	64.05
(1,366)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	20	45.5	62.46
(1,164)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	20	28.87	60.49
(1,215)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	20	36.79	58.59
(1,239)	1:A:18:PRO:N	1:A:18:PRO:CA	1:A:18:PRO:C	1:A:19:ALA:N	20	33.42	53.24
(1,501)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	20	44.44	51.34
(1,12)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:C	1:A:15:ALA:N	20	38.98	48.03
(1,363)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	20	21.18	47.84
(1,156)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:C	1:A:150:ARG:N	20	23.73	46.72
(1,30)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:ALA:N	17	34.55	46.71
(1,362)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	20	28.83	43.52
(1,477)	1:A:93:PRO:N	1:A:93:PRO:CA	1:A:93:PRO:C	1:A:94:SER:N	20	25.77	38.77
(1,68)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:GLU:N	15	13.01	34.36
(1,356)	1:A:53:PRO:N	1:A:53:PRO:CA	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	19	20.14	34.3
(1,32)	1:A:27:ALA:N	1:A:27:ALA:CA	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	18	18.38	31.7
(1,162)	1:A:152:SER:N	1:A:152:SER:CA	1:A:152:SER:C	1:A:153:LEU:N	16	15.04	31.44
(1,502)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	11	10.58	29.64
(1,72)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	20	13.64	28.76
					•		



Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean (o)	Max (
(1,84)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	19	17.46	28.5
(1,56)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ALA:N	7	10.38	27.32
(1,88)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	12	10.39	27.19
(1,80)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	20	16.27	27.04
(1,78)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	19	14.61	25.84
(1,16)	1:A:19:ALA:N	1:A:19:ALA:CA	1:A:19:ALA:C	1:A:20:LEU:N	19	16.76	24.89
(1,18)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	14	9.77	22.14
(1,355)	1:A:52:SER:N	1:A:52:SER:CA	1:A:52:SER:C	1:A:53:PRO:N	19	13.11	21.25
(1,52)	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:C	1:A:52:SER:N	18	10.79	20.88
(1,607)	1:A:139:PRO:N	1:A:139:PRO:CA	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	12	6.05	19.38
(1,82)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	17	9.62	19.37
(1,476)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	1:A:93:PRO:N	6	9.4	18.75
(1,625)	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	1:A:144:PRO:N	12	7.57	14.81
(1,230)	1:A:15:ALA:N	1:A:15:ALA:CA	1:A:15:ALA:C	1:A:16:PRO:N	11	6.36	14.01
(1,606)	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	1:A:139:PRO:N	6	7.61	13.41
(1,136)	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	1:A:125:PHE:N	4	2.26	8.38
(1,76)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	1:A:76:PRO:N	15	3.28	5.89
(1,74)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:C	1:A:74:GLY:N	14	3.3	5.65
(1,148)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:C	1:A:133:GLU:N	7	1.97	4.69
(1,58)	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	1:A:60:ARG:N	11	1.26	3.81
(1,22)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:C	1:A:23:ARG:N	4	2.15	3.24
(1,144)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	1:A:131:ALA:N	10	1.26	3.19
(1,364)	1:A:56:PRO:N	1:A:56:PRO:CA	1:A:56:PRO:C	1:A:57:PRO:N	11	1.72	3.16
(1,196)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1	3.08	3.08
(1,154)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:C	1:A:149:THR:N	6	1.46	2.89
(1,36)	1:A:33:SER:N	1:A:33:SER:CA	1:A:33:SER:C	1:A:34:LEU:N	7	0.87	2.79
(1,120)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:C	1:A:117:MET:N	3	1.22	2.58
(1,140)	1:A:126:ASP:N	1:A:126:ASP:CA	1:A:126:ASP:C	1:A:127:LEU:N	4	1.14	2.42
(1,46)	1:A:38:GLY:N	1:A:38:GLY:CA	1:A:38:GLY:C	1:A:39:TYR:N	7	0.89	2.41
(1,142)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	6	0.96	2.35
(1,48)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:C	1:A:40:HIS:N	6	1.35	2.2
(1,150)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:C	1:A:134:ILE:N	7	0.8	2.18
(1,50)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	9	0.96	2.12
(1,134)	1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:CA	1:A:123:ASN:C	1:A:124:GLY:N	7	1.01	2.07
(1,104)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	16	1.05	2.03
(1,122)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:C	1:A:118:LYS:N	5	0.91	2.0
(1,2)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	1:A:9:CYS:N	5	0.72	1.88
(1,34)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:C	1:A:32:GLY:N	5	0.82	1.81
(1,66)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:C	1:A:69:PHE:N	10	0.67	1.67
(1,128)	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:C	1:A:121:ASP:N	2	1.24	1.67
(1,98)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	1:A:102:TYR:N	1	1.63	1.63
(1,102)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:C	1:A:104:GLY:N	4	0.7	1.6
(1,138)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:C	1:A:126:ASP:N	4	0.87	1.51
(1,112)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:C	1:A:113:TYR:N	9	0.75	1.33
(1,108)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:C	1:A:111:ALA:N	6	0.72	1.26
(1,54)	1:A:52:SER:N	1:A:52:SER:CA	1:A:52:SER:C	1:A:53:PRO:N	3	0.89	1.25
(1,26)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLN:N	5	0.85	1.25
(1,152)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1	1.17	1.17
(1,24)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	5	0.79	1.16
(1,160)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:C	1:A:152:SER:N	2	0.72	1.14
(1,60)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:C	1:A:61:TYR:N	1	0.96	0.96



Key	$\frac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean (o)	Max (
(1,8)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:C	1:A:13:GLU:N	2	0.41	0.82
(1,0) $(1,146)$	1:A:131:ALA:N	1:A:12:L15:CA 1:A:131:ALA:CA	1:A:131:ALA:C	1:A:132:TYR:N	3	0.41	0.82
(1,140) $(1,106)$	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:C	1:A:110:GLU:N	2	0.62	0.73
(1,126)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:C	1:A:120:VAL:N	2	0.65	0.68
(1,120) $(1,118)$	1:A:115:ALA:N	1:A:115:ALA:CA	1:A:115:ALA:C	1:A:116:LEU:N	1	0.59	0.59
(1,158)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:C	1:A:151:VAL:N	2	0.44	0.55
(1,160) $(1,6)$	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	1:A:12:LYS:N	4	0.33	0.52
(1,90)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:ALA:N	2	0.43	0.5
(1,62)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:C	1:A:62:PHE:N	2	0.44	0.5
(1,94)	1:A:99:SER:N	1:A:99:SER:CA	1:A:99:SER:C	1:A:100:SER:N	2	0.4	0.44
(1,64)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:C	1:A:63:GLY:N	1	0.44	0.44
(1,10)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:C	1:A:14:LEU:N	3	0.38	0.43
(1,438)	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	2	0.35	0.42
(1,116)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:C	1:A:115:ALA:N	2	0.31	0.39
(1,110) $(1,20)$	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	1:A:22:ILE:N	4	0.18	0.32
(1,124)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:C	1:A:119:TRP:N	1	0.26	0.26
(1,567)	1:A:129:GLY:N	1:A:129:GLY:CA	1:A:129:GLY:C	1:A:130:GLU:N	1	0.24	0.24
(1,96)	1:A:100:SER:N	1:A:100:SER:CA	1:A:100:SER:C	1:A:101:LEU:N	1	0.08	0.08
(1,622)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	19	55.0	134.91
(1,509)	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	20	110.24	134.9
(1,478)	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	20	108.21	134.68
(1,597)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	20	53.11	134.6
(1,360)	1:A:54:SER:C	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	20	118.48	134.5
(1,173)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	20	57.35	133.75
(1,408)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	20	89.04	133.7
(1,191)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	20	55.99	133.4
(1,466)	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	20	117.38	132.71
(1,272)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	20	60.8	132.59
(1,169)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	20	63.51	132.41
(1,679)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	20	50.48	131.44
(1,685)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	20	52.56	131.24
(1,389)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	20	73.24	130.48
(1,315)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	20	92.61	129.83
(1,680)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	19	46.94	129.56
(1,322)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	20	120.29	129.55
(1,598)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	20	59.2	129.42
(1,686)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	19	68.13	129.19
(1,433)	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	1:A:79:GLY:CA	1:A:79:GLY:C	20	96.7	128.81
(1,564)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	20	88.93	128.79
(1,314)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	20	30.87	128.71
(1,661)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	20	112.63	128.37
(1,566)	1:A:128:SER:C	1:A:129:GLY:N	1:A:129:GLY:CA	1:A:129:GLY:C	20	63.95	128.02
(1,340)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	20	116.07	127.64
(1,187)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	20	69.64	127.58
(1,591)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	20	92.71	127.49
(1,427)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	20	108.46	127.2
(1,392)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	20	78.79	126.92
(1,264)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	20	72.46	126.52
(1,629)	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	10	58.3	126.05
(1,307)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	20	83.11	125.88
(1,181)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	20	59.9	125.24



Key	$rac{d\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean (o)	Max (
(1,382)	1:A:62:PHE:C	1:A:63:GLY:N	1:A:63:GLY:CA	1:A:63:GLY:C	20	78.97	124.81
(1,384)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	20	85.91	124.39
(1,328)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	20	113.71	124.11
(1,675)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	18	65.4	123.95
(1,303)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	20	91.48	123.92
(1,639)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	20	106.95	123.58
(1,602)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	20	93.52	123.47
(1,273)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	20	79.2	123.32
(1,199)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	20	70.94	123.07
(1,584)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	20	82.91	121.66
(1,390)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	20	60.38	121.18
(1,623)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	19	56.56	120.17
(1,667)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	20	82.96	120.11
(1,452)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	18	101.32	119.86
(1,198)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	19	49.66	119.11
(1,479)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	20	63.27	118.9
(1,344)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	20	46.63	118.58
(1,209)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	20	93.29	118.52
(1,174)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	20	66.02	118.31
(1,499)	1:A:103:ILE:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	20	88.19	118.28
(1,447)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	20	87.54	117.68
(1,270)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	20	49.43	115.83
(1,601)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	20	46.48	114.96
(1,306)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	20	40.39	114.55
(1,186)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	20	48.36	114.29
(1,609)	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	1:A:140:ALA:CA	1:A:140:ALA:C	8	21.74	114.12
(1,590)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	20	41.54	114.01
(1,612)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	20	89.18	113.13
(1,345)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	20	93.37	112.3
(1,393)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	20	44.71	111.42
(1,192)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	20	62.01	111.31
(1,480)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	20	76.73	110.88
(1,511)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	20	93.04	110.6
(1,358)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	20	92.43	110.21
(1,395)	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	20	57.65	110.17
(1,617)	1:A:141:GLU:C	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	20	64.94	109.91
(1,439)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	20	76.38	107.86
(1,170)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	20	43.49	107.06
(1,232)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	20	76.24	105.4
(1,446)	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	1:A:83:GLY:CA	1:A:83:GLY:C	20	51.38	104.43
(1,180)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	19	43.83	103.99
(1,450)	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	1:A:85:GLY:CA	1:A:85:GLY:C	20	40.9	103.42
(1,269)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	20	41.07	102.72
(1,563)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	20	51.07	101.19
(1,440)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	20	63.62	100.63
(1,448)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	20	52.46	100.45
(1,632)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	20	56.81	99.79
(1,633)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	20	83.19	99.22
(1,233)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	20	63.76	97.24
(1,666)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	20	40.54	96.43
(1,350)	1:A:49:GLN:C	1:A:50:GLY:N	1:A:50:GLY:CA	1:A:50:GLY:C	20	48.35	95.76



Key	$rac{d\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean (o)	Max (
(1,611)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	20	44.82	91.74
(1,674)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	19	32.38	90.85
(1,457)	1:A:86:ARG:C	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:C	20	45.27	89.77
(1,434)	1:A:79:GLY:C	1:A:80:GLY:N	1:A:80:GLY:CA	1:A:80:GLY:C	20	43.67	84.82
(1,583)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	20	57.09	83.01
(1,302)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	20	48.52	81.5
(1,409)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	20	50.83	81.11
(1,383)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	20	32.09	76.88
(1,210)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	20	46.71	76.42
(1,426)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	20	30.92	73.45
(1,342)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:GLY:N	1:A:48:GLY:CA	1:A:48:GLY:C	20	30.22	72.27
(1,334)	1:A:45:LEU:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	20	36.83	68.85
(1,638)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	20	33.05	66.33
(1,282)	1:A:31:LEU:C	1:A:32:GLY:N	1:A:32:GLY:CA	1:A:32:GLY:C	20	19.57	64.69
(1,357)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	20	47.57	61.9
(1,451)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	20	32.36	61.3
(1,510)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	20	41.46	57.93
(1,660)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	20	27.01	54.2
(1,81)	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	19	21.97	49.22
(1,19)	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	20	32.79	48.55
(1,327)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	20	26.29	45.35
(1,339)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	20	23.93	40.34
(1,628)	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	20	28.64	38.48
(1,418)	1:A:73:PHE:C	1:A:74:GLY:N	1:A:74:GLY:CA	1:A:74:GLY:C	19	19.64	33.31
(1,321)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	20	19.71	32.68
(1,608)	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	1:A:140:ALA:CA	1:A:140:ALA:C	20	27.19	32.01
(1,263)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	19	19.02	31.71
(1,57)	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	4	2.39	4.45
(1,137)	1:A:124:GLY:C	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:C	3	1.84	4.3
(1,155)	1:A:148:ARG:C	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:C	7	1.75	4.13
(1,73)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:C	9	2.14	3.73
(1,23)	1:A:22:ILE:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	10	1.61	3.2
(1,145)	1:A:130:GLU:C	1:A:131:ALA:N	1:A:131:ALA:CA	1:A:131:ALA:C	3	1.55	3.17
(1,55)	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	7	1.76	3.17
(1,103)	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	19	1.3	2.99
(1,77)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C	12	1.1	2.61
(1,141)	1:A:126:ASP:C	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:C	6	1.19	2.6
(1,91)	1:A:97:ALA:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	6	0.81	2.6
(1,49)	1:A:39:TYR:C	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:C	9	1.22	2.46
(1,45)	1:A:37:ALA:C	1:A:38:GLY:N	1:A:38:GLY:CA	1:A:38:GLY:C	1	2.4	2.4
(1,159)	1:A:150:ARG:C	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:C	7	1.13	2.37
(1,123)	1:A:117:MET:C	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:C	5	1.19	2.19
(1,27)	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:C	4	1.05	2.09
(1,67)	1:A:68:THR:C	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	4	1.13	1.74
(1,105)	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:C	9	0.91	1.72
(1,33)	1:A:30:GLU:C	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:C	4	0.84	1.71
(1,75)	1:A:74:GLY:C	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	3	0.8	1.69
(1,89)	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	3	0.83	1.67
(1,131)	1:A:121:ASP:C	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:C	2	1.58	1.61
(1,61)	1:A:60:ARG:C	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:C	1	1.58	1.58
(1,101)	1:A:102:TYR:C	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:C	2	0.85	1.55



Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean (o)	Max (
(1,25)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	3	1.19	1.52
(1,63)	1:A:61:TYR:C	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:C	4	0.95	1.48
(1,71)	1:A:70:GLU:C	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:C	4	1.05	1.44
(1,129)	1:A:120:VAL:C	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:C	3	0.74	1.26
(1,5)	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	3	1.08	1.26
(1,127)	1:A:119:TRP:C	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:C	2	1.14	1.18
(1,119)	1:A:115:ALA:C	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:C	2	0.68	1.17
(1,85)	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	11	0.59	1.17
(1,143)	1:A:129:GLY:C	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	3	0.71	1.15
(1,161)	1:A:151:VAL:C	1:A:152:SER:N	1:A:152:SER:CA	1:A:152:SER:C	4	0.68	1.12
(1,125)	1:A:118:LYS:C	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:C	1	1.06	1.06
(1,147)	1:A:131:ALA:C	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:C	7	0.53	1.05
(1,1)	1:A:7:PHE:C	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	4	0.47	1.02
(1,111)	1:A:111:ALA:C	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:C	2	0.64	0.92
(1,153)	1:A:147:LEU:C	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:C	3	0.58	0.9
(1,47)	1:A:38:GLY:C	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:C	1	0.88	0.88
(1,135)	1:A:123:ASN:C	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	9	0.46	0.75
(1,59)	1:A:59:ALA:C	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:C	1	0.75	0.75
(1,121)	1:A:116:LEU:C	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:C	2	0.39	0.74
(1,133)	1:A:122:ASP:C	1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:CA	1:A:123:ASN:C	1	0.7	0.7
(1,139)	1:A:125:PHE:C	1:A:126:ASP:N	1:A:126:ASP:CA	1:A:126:ASP:C	1	0.63	0.63
(1,9)	1:A:12:LYS:C	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:C	4	0.3	0.55
(1,87)	1:A:93:PRO:C	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	4	0.3	0.52
(1,35)	1:A:32:GLY:C	1:A:33:SER:N	1:A:33:SER:CA	1:A:33:SER:C	1	0.5	0.5
(1,43)	1:A:36:GLU:C	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	1	0.48	0.48
(1,107)	1:A:109:ILE:C	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:C	2	0.28	0.42
(1,93)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:SER:N	1:A:99:SER:CA	1:A:99:SER:C	3	0.3	0.41
(1,7)	1:A:11:LEU:C	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:C	1	0.4	0.4
(1,37)	1:A:33:SER:C	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:C	3	0.3	0.39
(1,79)	1:A:87:VAL:C	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1	0.35	0.35
(1,53)	1:A:51:LYS:C	1:A:52:SER:N	1:A:52:SER:CA	1:A:52:SER:C	1	0.3	0.3
(1,83)	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:C	3	0.22	0.3
(1,17)	1:A:19:ALA:C	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:C	1	0.27	0.27
(1,157)	1:A:149:THR:C	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:C	1	0.23	0.23
(1,113)	1:A:112:VAL:C	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:C	1	0.16	0.16
(1,65)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:C	1	0.02	0.02
(1,311)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	20	108.82	134.57
(1,581)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	20	104.04	134.48
(1,251)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	20	53.62	134.35
(1,497)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	20	65.37	133.85
(1,252)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	20	63.38	133.62
(1,518)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	20	86.07	131.64
(1,312)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	20	29.84	131.51
(1,498)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	20	45.37	129.52
(1,519)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	20	41.93	125.5
(1,582)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	20	34.73	117.25
(1,514)	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	1:A:108:GLU:CD	20	142.4	164.93
(1,225)	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	1:A:13:GLU:CD	20	115.31	164.9
(1,522)	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	1:A:110:GLU:CD	20	121.88	164.81
(1,348)	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	1:A:49:GLN:CD	20	131.78	164.78
(1,195)	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	1:A:6:GLN:CD	20	113.65	164.7



Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	$\mathbf{Mean}\;(\;\circ\;)$	Max (
(1,184)	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	1:A:4:GLU:CD	20	103.49	164.62
(1,636)	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	1:A:146:GLN:CD	20	137.86	164.6
(1,213)	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	1:A:10:GLU:CD	20	137.91	164.58
(1,615)	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	1:A:141:GLU:CD	20	93.31	164.5
(1,325)	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	1:A:44:GLN:CD	20	99.1	164.30
(1,683)	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	1:A:157:GLU:CD	20	124.86	164.31
(1,430)	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	1:A:78:GLU:CD	20	89.04	164.21
(1,260)	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	1:A:25:GLN:CD	20	116.18	164.12
(1,276)	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	1:A:30:GLU:CD	20	123.64	163.78
(1,295)	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	1:A:36:GLU:CD	20	100.67	163.73
(1,412)	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	1:A:72:GLU:CD	20	133.92	163.39
(1,405)	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	1:A:70:GLU:CD	20	117.51	163.38
(1,577)	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	1:A:133:GLU:CD	20	134.11	163.18
(1,570)	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	1:A:130:GLU:CD	20	117.0	162.81
(1,443)	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	1:A:82:GLU:CD	20	105.35	162.59
(1,332)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	20	95.91	149.85
(1,337)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	20	50.51	146.5
(1,287)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	20	62.13	145.81
(1,243)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	20	82.01	145.74
(1,541)	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	1:A:118:LYS:CD	20	88.78	144.94
(1,455)	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	1:A:86:ARG:CD	20	111.0	144.89
(1,228)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	20	59.05	144.79
(1,483)	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	1:A:96:LYS:CD	20	50.09	144.74
(1,286)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	20	58.2	144.73
(1,642)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	20	85.82	144.71
(1,336)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	20	58.42	144.69
(1,222)	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	1:A:12:LYS:CD	20	86.46	144.63
(1,647)	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	1:A:148:ARG:CD	20	111.7	144.53
(1,561)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	20	64.23	144.42
(1,255)	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	1:A:23:ARG:CD	20	120.38	144.41
(1,373)	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	1:A:60:ARG:CD	20	119.49	144.36
(1,562)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	20	77.44	144.28
(1,471)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	20	71.74	144.2
(1,229)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	20	55.86	144.13
(1,652)	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	1:A:150:ARG:CD	20	126.78	144.04
(1,659)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	20	76.22	143.86
(1,488)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	20	73.0	143.74
(1,534)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	20	87.89	143.63
(1,354)	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	1:A:51:LYS:CD	20	107.94	143.52
(1,535)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	20	49.11	143.12
(1,319)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	20	81.29	143.02
(1,280)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	20	57.22	143.02
(1,670)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	20	82.47	142.73
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	20	90.63	142.29
(1,318)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	20	66.13	142.08
(1,472)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	20	81.34	141.54
(1,242)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	20	59.65	141.3
(1,281)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	20	68.78	140.88
(1,658)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	20	60.78	140.79
(1,489)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	20	91.5	140.59
(1,594)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	20	64.83	139.62
						0 1 1	



(1,246) 1-A:21:LEUCA	Max (
(1.167) 1:A:1:MET:CA	138.7
(1,267) 1:A;28:MET;CA	138.3
(1,538) 1:A:117:MET:CA	134.6
(1,331) 1:A:45:LEU:CA	134.4
(1,387) 1:A:64:MET:CA 1:A:64:MET:CB 1:A:64:MET:CG 1:A:64:MET:SD 20 56.19 (1,664) 1:A:154:MET:CA 1:A:154:MET:CB 1:A:154:MET:CG 1:A:154:MET:SD 20 84.65 (1,247) 1:A:21:LEU:CA 1:A:21:LEU:CB 1:A:154:MET:CG 1:A:154:MET:SD 20 69.24 (1,218) 1:A:11:LEU:CA 1:A:11:LEU:CB 1:A:11:LEU:CG 1:A:11:LEU:CD1 20 69.24 (1,218) 1:A:11:LEU:CA 1:A:11:LEU:CB 1:A:11:LEU:CG 1:A:11:LEU:CD1 20 36.75 (1,613) 1:A:155:LEU:CA 1:A:147:LEU:CB 1:A:147:LEU:CG 1:A:155:LEU:CD1 20 36.75 (1,643) 1:A:132:TYR:CA 1:A:147:LEU:CB 1:A:147:LEU:CB 1:A:147:LEU:CD1 20 36.75 (1,401) 1:A:69:PHE:CA 1:A:69:PHE:CB 1:A:69:PHE:CG 1:A:69:PHE:CD1 20 50.02 (1,573) 1:A:132:TYR:CA 1:A:132:TYR:CB 1:A:132:TYR:CG 1:A:33:TYR:CD1 20 54.29 (1,298) 1:A:39:TYR:CA 1:A:39:TYR:CB 1:A:39:TYR:CD1 20 54.62 (1,421) 1:A:75:PHE:CA 1:A:75:PHE:CB 1:A:75:PHE:CG 1:A:75:PHE:CD1 20 55.02 (1,202) 1:A:75:PHE:CA 1:A:75:PHE:CB 1:A:75:PHE:CG 1:A:75:PHE:CD1 20 55.02 (1,202) 1:A:75:PHE:CA 1:A:13:TYR:CB 1:A:13:TYR:CB 1:A:13:TYR:CD 20 57.4 (1,380) 1:A:62:PHE:CA 1:A:62:PHE:CB 1:A:13:TYR:CB 1:A:13:TYR:CD 20 57.4 (1,380) 1:A:62:PHE:CA 1:A:62:PHE:CB 1:A:61:TYR:CB 1:A:61:TYR:CD 20 47.49 (1,376) 1:A:61:TYR:CA 1:A:61:TYR:CB 1:A:61:TYR:CB 1:A:61:TYR:CD 20 47.49 (1,376) 1:A:61:TYR:CA 1:A:61:TYR:CB 1:A:61:TYR:CB 1:A:61:TYR:CD 20 56.19 (1,177) 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:CB 1:A:61:TYR:CB 1:A:13:TYR:CD 20 49.44 (1,492) 1:A:13:TYR:CA 1:A:106:TYR:CB 1:A:13:TYR:CB 1:A:13:TYR:CD 20 49.49 (1,492) 1:A:13:TYR:CA 1:A:106:TYR:CB 1:A:13:TYR:CB 1:A:13:TYR:CD 20 49.49 (1,492) 1:A:13:TYR:CA 1:A:106:TYR:CB 1:A:13:TYR:CB 1:A:13:TYR:CD 20 49.49 (1,492) 1:A:35:PHE:CA 1:A:13:TYR:CB 1:A:13:TYR:CB 1:A:13:TYR:CD 20 49.49 (1,492) 1:A:19:TYR:CA 1:A:19:TYR:CB 1:A:13:TYR:CB 1:A:13:TYR:CD 20 49.49 (1,492) 1:A:14:14:LEU:CA 1	134.3
(1,664) 1:A:154:MET:CA 1:A:154:MET:CB 1:A:154:MET:CG 1:A:154:MET:SD 20 84.65 (1,247) 1:A:21:LEU:CA 1:A:21:LEU:CB 1:A:21:LEU:CG 1:A:21:LEU:CD 20 51.87 (1,218) 1:A:11:EU:CA 1:A:11:EU:CB 1:A:11:EU:CB 20 51.87 (1,671) 1:A:155:LEU:CA 1:A:155:LEU:CB 1:A:155:LEU:CG 1:A:155:LEU:CD 20 36.75 (1,671) 1:A:155:LEU:CA 1:A:155:LEU:CB 1:A:155:LEU:CG 1:A:155:LEU:CD 20 36.75 (1,671) 1:A:69:PHE:CA 1:A:69:PHE:CB 1:A:147:LEU:CG 1:A:147:LEU:CD 20 40.15 (1,401) 1:A:69:PHE:CA 1:A:69:PHE:CB 1:A:69:PHE:CG 1:A:69:PHE:CD 20 50.02 (1,573) 1:A:132:TYR:CA 1:A:132:TYR:CB 1:A:132:TYR:CG 1:A:332:TYR:CD 20 54.29 (1,298) 1:A:39:TYR:CA 1:A:39:TYR:CB 1:A:39:TYR:CG 1:A:39:TYR:CD 20 54.62 (1,421) 1:A:75:PHE:CA 1:A:75:PHE:CB 1:A:75:PHE:CG 1:A:75:PHE:CD 20 55.02 (1,202) 1:A:75:PHE:CA 1:A:75:PHE:CB 1:A:75:PHE:CG 1:A:75:PHE:CD 20 55.02 (1,202) 1:A:75:PHE:CA 1:A:113:TYR:CB 1:A:113:TYR:CG 1:A:113:TYR:CD 20 57.4 (1,528) 1:A:113:TYR:CA 1:A:113:TYR:CB 1:A:113:TYR:CG 1:A:113:TYR:CD 20 57.4 (1,376) 1:A:61:PTR:CA 1:A:61:PTR:CB 1:A:61:PTR:CG 1:A:61:PTR:CD 20 56.19 (1,376) 1:A:61:PTR:CA 1:A:61:TYR:CB 1:A:61:TYR:CG 1:A:61:TYR:CD 20 56.19 (1,177) 1:A:3:PHE:CA 1:A:3:PHE:CB 1:A:3:PHE:CG 1:A:61:PTR:CD 20 56.19 (1,177) 1:A:3:PHE:CA 1:A:106:TYR:CB 1:A:113:TYR:CG 1:A:61:TYR:CD 20 56.19 (1,177) 1:A:106:TYR:CA 1:A:61:TYR:CB 1:A:61:TYR:CG 1:A:61:TYR:CD 20 56.19 (1,177) 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:CB 1:A:106:TYR:CB 1:A:102:TYR:CD 20 50.19 (1,587) 1:A:135:TYR:CA 1:A:106:TYR:CB 1:A:135:TYR:CG 1:A:102:TYR:CD 20 53.36 (1,599) 1:A:58:PHE:CA 1:A:135:TYR:CB 1:A:135:TYR:CG 1:A:135:TYR:CD 19 48.27 (1,416) 1:A:73:PHE:CA 1:A:35:PHE:CB 1:A:35:PHE:CG 1:A:35:PHE:CD 20 53.36 (1,369) 1:A:58:PHE:CA 1:A:35:PHE:CB 1:A:35:PHE:CG 1:A:35:PHE:CD 20 53.36 (1,369) 1:A:35:PHE:CA 1:A	133.9
(1,247)	133.2
(1,218)	132.5
(1,671) 1:A:155:LEU:CA	131.0
(1,643) 1:A:147:LEU:CA	130.0
(1,401) 1:A:69:PHE:CA 1:A:69:PHE:CB 1:A:69:PHE:CG 1:A:69:PHE:CD1 20 50.02 (1,573) 1:A:132:TYR:CA 1:A:132:TYR:CB 1:A:132:TYR:CB 1:A:132:TYR:CD1 20 54.29 (1,298) 1:A:39:TYR:CA 1:A:39:TYR:CB 1:A:39:TYR:CG 1:A:39:TYR:CD1 20 54.62 (1,421) 1:A:7:PHE:CA 1:A:7:PHE:CB 1:A:7:PHE:CG 1:A:39:TYR:CD1 20 55.02 (1,202) 1:A:7:PHE:CA 1:A:7:PHE:CB 1:A:7:PHE:CG 1:A:7:PHE:CD1 20 57.4 (1,528) 1:A:113:TYR:CA 1:A:A:113:TYR:CB 1:A:61:TYR:CB 1:A:61:TYR:CD1 20 47.49 (1,376) 1:A:61:TYR:CA 1:A:61:TYR:CB 1:A:61:TYR:CD1 20 47.49 (1,376) 1:A:61:TYR:CA 1:A:3:PHE:CB 1:A:3:PHE:CB 1:A:3:PHE:CD1 20 47.49 (1,577) 1:A:13:5:TYR:CA 1:A:10:TYR:CB 1:A:10:TYR:CG 1:A:10:TYR:CD1 20 48.49 (1,492) 1:A:13:5:TYR:CA 1:A:10:TYR:CB 1:A:10:TYR:CG 1:A:10:TYR:CD1	129.3
(1,573) 1:A:132:TYR:CA 1:A:132:TYR:CB 1:A:132:TYR:CG 1:A:39:TYR:CD1 20 54.29 (1,298) 1:A:39:TYR:CA 1:A:39:TYR:CB 1:A:39:TYR:CG 1:A:39:TYR:CD1 20 54.62 (1,202) 1:A:7:PHE:CA 1:A:7:PHE:CB 1:A:7:PHE:CG 1:A:7:PHE:CD1 20 55.02 (1,528) 1:A:113:TYR:CA 1:A:113:TYR:CB 1:A:113:TYR:CG 1:A:113:TYR:CD1 20 44.13 (1,380) 1:A:62:PHE:CA 1:A:62:PHE:CB 1:A:62:PHE:CG 1:A:61:TYR:CD1 20 47.49 (1,376) 1:A:61:TYR:CA 1:A:61:TYR:CB 1:A:61:TYR:CG 1:A:61:TYR:CD1 20 56.19 (1,177) 1:A:3:PHE:CA 1:A:3:PHE:CB 1:A:4:61:TYR:CG 1:A:4:61:TYR:CD1 20 56.19 (1,492) 1:A:102:TYR:CA 1:A:106:TYR:CB 1:A:106:TYR:CG 1:A:135:TYR:CD1 20 48.49 (1,492) 1:A:135:TYR:CA 1:A:102:TYR:CB 1:A:102:TYR:CG 1:A:135:TYR:CD1 19 51.61 (1,587) 1:A:135:TYR:CA 1:A:135:TYR:CB 1:A:135:TYR:C	123.5
(1,298) 1:A:39:TYR:CA 1:A:39:TYR:CB 1:A:39:TYR:CG 1:A:39:TYR:CD1 20 54.62 (1,421) 1:A:75:PHE:CA 1:A:75:PHE:CB 1:A:75:PHE:CG 1:A:75:PHE:CD1 20 55.02 (1,202) 1:A:7:PHE:CA 1:A:7:PHE:CB 1:A:7:PHE:CD1 20 57.4 (1,528) 1:A:113:TYR:CA 1:A:113:TYR:CB 1:A:113:TYR:CG 1:A:61:TYR:CD1 20 44.13 (1,380) 1:A:62:PHE:CA 1:A:61:TYR:CB 1:A:61:TYR:CG 1:A:61:TYR:CD1 20 47.49 (1,376) 1:A:61:TYR:CA 1:A:61:TYR:CB 1:A:61:TYR:CG 1:A:61:TYR:CD1 20 56.19 (1,177) 1:A:3:PHE:CA 1:A:3:PHE:CB 1:A:3:PHE:CG 1:A:10:TYR:CD1 20 49.44 (1,597) 1:A:106:TYR:CA 1:A:102:TYR:CB 1:A:102:TYR:CG 1:A:106:TYR:CD1 20 48.49 (1,492) 1:A:106:TYR:CA 1:A:135:TYR:CB 1:A:135:TYR:CG 1:A:135:TYR:CD1 19 48.27 (1,416) 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:CB 1:A:73:PHE:CG 1:A:73:PHE:CD1	65.46
(1,421) 1:A:75:PHE:CA 1:A:75:PHE:CB 1:A:75:PHE:CG 1:A:75:PHE:CD1 20 55.02 (1,202) 1:A:7:PHE:CA 1:A:7:PHE:CB 1:A:7:PHE:CG 1:A:7:PHE:CD1 20 57.4 (1,528) 1:A:113:TYR:CA 1:A:113:TYR:CB 1:A:113:TYR:CG 1:A:113:TYR:CD1 20 44.13 (1,380) 1:A:62:PHE:CA 1:A:62:PHE:CB 1:A:62:PHE:CD1 20 47.49 (1,376) 1:A:61:TYR:CA 1:A:61:TYR:CB 1:A:61:TYR:CG 1:A:61:TYR:CD1 20 56.19 (1,177) 1:A:3:PHE:CA 1:A:3:PHE:CB 1:A:106:TYR:CG 1:A:3:PHE:CD1 20 49.44 (1,507) 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:CB 1:A:106:TYR:CG 1:A:106:TYR:CD1 20 48.49 (1,492) 1:A:102:TYR:CA 1:A:135:TYR:CB 1:A:135:TYR:CG 1:A:135:TYR:CD1 19 51.61 (1,416) 1:A:3:5:TYR:CA 1:A:135:TYR:CB 1:A:135:TYR:CD1 19 48.27 (1,416) 1:A:3:5:PHE:CA 1:A:3:5:PHE:CB 1:A:3:5:PHE:CG 1:A:3:5:PHE:CD1 20	65.41
(1,202) 1:A:7:PHE:CA 1:A:7:PHE:CB 1:A:7:PHE:CG 1:A:7:PHE:CD1 20 57.4 (1,528) 1:A:113:TYR:CA 1:A:113:TYR:CB 1:A:113:TYR:CG 1:A:113:TYR:CD1 20 44.13 (1,528) 1:A:613:TYR:CA 1:A:62:PHE:CB 1:A:62:PHE:CG 1:A:62:PHE:CD1 20 47.49 (1,376) 1:A:61:TYR:CA 1:A:61:TYR:CB 1:A:61:TYR:CG 1:A:61:TYR:CD1 20 56.19 (1,177) 1:A:3:PHE:CA 1:A:3:PHE:CB 1:A:61:TYR:CG 1:A:10:TYR:CD1 20 49.44 (1,507) 1:A:106:TYR:CA 1:A:100:TYR:CB 1:A:100:TYR:CG 1:A:10:TYR:CD1 20 48.49 (1,492) 1:A:102:TYR:CA 1:A:135:TYR:CB 1:A:135:TYR:CG 1:A:135:TYR:CD1 19 51.61 (1,587) 1:A:135:TYR:CA 1:A:135:TYR:CB 1:A:135:TYR:CG 1:A:135:TYR:CD1 19 48.27 (1,416) 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:CB 1:A:73:PHE:CG 1:A:135:TYR:CD1 19 48.27 (1,369) 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:CB 1:A:35:PHE:CG	65.21
(1,528) 1:A:113:TYR:CA 1:A:113:TYR:CB 1:A:113:TYR:CG 1:A:113:TYR:CD1 20 44.13 (1,380) 1:A:62:PHE:CA 1:A:62:PHE:CB 1:A:62:PHE:CG 1:A:62:PHE:CD1 20 47.49 (1,376) 1:A:61:TYR:CA 1:A:61:TYR:CB 1:A:61:TYR:CG 1:A:61:TYR:CD1 20 56.19 (1,177) 1:A:3:PHE:CA 1:A:3:PHE:CB 1:A:3:PHE:CG 1:A:3:PHE:CD1 20 49.44 (1,507) 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:CB 1:A:102:TYR:CG 1:A:106:TYR:CD1 20 48.49 (1,492) 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:CB 1:A:102:TYR:CG 1:A:106:TYR:CD1 19 51.61 (1,587) 1:A:135:TYR:CA 1:A:135:TYR:CB 1:A:135:TYR:CG 1:A:135:TYR:CD1 19 48.27 (1,416) 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:CB 1:A:73:PHE:CG 1:A:73:PHE:CD1 20 53.36 (1,290) 1:A:35:PHE:CA 1:A:35:PHE:CB 1:A:35:PHE:CG 1:A:35:PHE:CD1 20 49.7 (1,290) 1:A:35:PHE:CA 1:A:143:LEU:CB 1:A:145:PHE:CB </td <td>64.95</td>	64.95
(1,380) 1:A:62:PHE:CA 1:A:62:PHE:CB 1:A:62:PHE:CG 1:A:62:PHE:CD1 20 47.49 (1,376) 1:A:61:TYR:CA 1:A:61:TYR:CB 1:A:61:TYR:CG 1:A:61:TYR:CD1 20 56.19 (1,177) 1:A:3:PHE:CA 1:A:3:PHE:CB 1:A:3:PHE:CG 1:A:3:PHE:CD1 20 49.44 (1,507) 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:CB 1:A:106:TYR:CG 1:A:106:TYR:CD1 20 48.49 (1,492) 1:A:102:TYR:CA 1:A:102:TYR:CB 1:A:102:TYR:CG 1:A:102:TYR:CD1 19 51.61 (1,587) 1:A:135:TYR:CA 1:A:135:TYR:CB 1:A:135:TYR:CG 1:A:135:TYR:CD1 19 48.27 (1,416) 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:CB 1:A:73:PHE:CG 1:A:73:PHE:CD1 20 53.36 (1,369) 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:CB 1:A:58:PHE:CG 1:A:35:PHE:CD1 20 49.7 (1,290) 1:A:35:PHE:CA 1:A:143:LEU:CB 1:A:143:LEU:CB 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CB<	64.84
(1,376) 1:A:61:TYR:CA 1:A:61:TYR:CB 1:A:61:TYR:CG 1:A:61:TYR:CD1 20 56.19 (1,177) 1:A:3:PHE:CA 1:A:3:PHE:CB 1:A:3:PHE:CG 1:A:3:PHE:CD1 20 49.44 (1,507) 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:CB 1:A:106:TYR:CG 1:A:106:TYR:CD1 20 48.49 (1,492) 1:A:102:TYR:CA 1:A:102:TYR:CB 1:A:102:TYR:CG 1:A:102:TYR:CD1 19 51.61 (1,587) 1:A:135:TYR:CA 1:A:135:TYR:CB 1:A:135:TYR:CG 1:A:135:TYR:CD1 19 51.61 (1,416) 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:CB 1:A:73:PHE:CG 1:A:135:TYR:CD1 19 48.27 (1,416) 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:CB 1:A:73:PHE:CG 1:A:135:PHE:CD1 20 53.36 (1,369) 1:A:35:PHE:CA 1:A:35:PHE:CB 1:A:43:PHE:CG 1:A:43:PHE:CD1 20 49.7 (1,290) 1:A:35:PHE:CA 1:A:35:PHE:CB 1:A:43:PHE:CG 1:A:43:LEU:CD 18 34.38 (1,556) 1:A:14:1EU:N 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB	64.84
(1,177) 1:A:3:PHE:CA 1:A:3:PHE:CB 1:A:3:PHE:CG 1:A:3:PHE:CD1 20 49.44 (1,507) 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:CB 1:A:106:TYR:CG 1:A:106:TYR:CD1 20 48.49 (1,492) 1:A:102:TYR:CA 1:A:102:TYR:CB 1:A:102:TYR:CG 1:A:102:TYR:CD1 19 51.61 (1,587) 1:A:135:TYR:CA 1:A:135:TYR:CB 1:A:135:TYR:CG 1:A:135:TYR:CD1 19 48.27 (1,416) 1:A:73:PHE:CA 1:A:135:TYR:CB 1:A:135:TYR:CG 1:A:135:TYR:CD1 19 48.27 (1,416) 1:A:73:PHE:CA 1:A:135:PHE:CB 1:A:135:PHE:CG 1:A:135:PHE:CD1 20 53.36 (1,369) 1:A:58:PHE:CA 1:A:45:PHE:CB 1:A:58:PHE:CG 1:A:45:PHE:CD1 20 49.7 (1,290) 1:A:35:PHE:CA 1:A:45:PHE:CB 1:A:45:PHE:CG 1:A:45:PHE:CD1 20 45.5 (1,316) 1:A:43:LEU:CA 1:A:125:PHE:CB 1:A:125:PHE:CB 1:A:125:PHE:CD1 20 45.5 (1,316) 1:A:49:LEU:N 1:A:49:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB </td <td>64.62</td>	64.62
(1,507) 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:CB 1:A:106:TYR:CG 1:A:106:TYR:CD1 20 48.49 (1,492) 1:A:102:TYR:CA 1:A:102:TYR:CB 1:A:102:TYR:CG 1:A:102:TYR:CD1 19 51.61 (1,587) 1:A:135:TYR:CA 1:A:135:TYR:CB 1:A:135:TYR:CG 1:A:135:TYR:CD1 19 48.27 (1,416) 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:CB 1:A:73:PHE:CG 1:A:73:PHE:CD1 20 53.36 (1,369) 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:CB 1:A:58:PHE:CG 1:A:58:PHE:CD1 20 49.7 (1,290) 1:A:35:PHE:CA 1:A:35:PHE:CB 1:A:35:PHE:CG 1:A:35:PHE:CD1 18 34.38 (1,556) 1:A:125:PHE:CA 1:A:125:PHE:CB 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 20 45.5 (1,316) 1:A:43:LEU:N 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 20 75.9 (1,329) 1:A:45:LEU:N 1:A:45:LEU:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CG 20 75.9 (1,329) 1:A:45:LEU:N 1:A:153:LEU:CA 1:A:153:LEU:CB	64.57
(1,492) 1:A:102:TYR:CA 1:A:102:TYR:CB 1:A:102:TYR:CG 1:A:102:TYR:CD1 19 51.61 (1,587) 1:A:135:TYR:CA 1:A:135:TYR:CB 1:A:135:TYR:CG 1:A:135:TYR:CD1 19 48.27 (1,416) 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:CB 1:A:73:PHE:CG 1:A:73:PHE:CD1 20 53.36 (1,369) 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:CB 1:A:58:PHE:CG 1:A:58:PHE:CD1 20 49.7 (1,290) 1:A:35:PHE:CA 1:A:35:PHE:CB 1:A:35:PHE:CG 1:A:35:PHE:CD1 18 34.38 (1,556) 1:A:125:PHE:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 20 45.5 (1,316) 1:A:43:LEU:N 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 20 127.34 (1,469) 1:A:91:LEU:N 1:A:45:LEU:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CG 20 75.9 (1,329) 1:A:45:LEU:N 1:A:45:LEU:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CG 20 147.86 (1,566) 1:A:153:LEU:N 1:A:153:LEU:CA 1:A:153:LEU:CB 1:A:145:ME:CG	64.45
(1,587) 1:A:135:TYR:CA 1:A:135:TYR:CB 1:A:135:TYR:CG 1:A:135:TYR:CD 19 48.27 (1,416) 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:CB 1:A:73:PHE:CG 1:A:73:PHE:CD1 20 53.36 (1,369) 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:CB 1:A:58:PHE:CG 1:A:58:PHE:CD1 20 49.7 (1,290) 1:A:35:PHE:CA 1:A:35:PHE:CB 1:A:35:PHE:CG 1:A:35:PHE:CD1 18 34.38 (1,556) 1:A:125:PHE:CA 1:A:125:PHE:CB 1:A:125:PHE:CG 1:A:43:LEU:CD 20 45.5 (1,316) 1:A:43:LEU:N 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 20 127.34 (1,469) 1:A:91:LEU:N 1:A:91:LEU:CA 1:A:49:LEU:CB 1:A:45:LEU:CG 20 75.9 (1,329) 1:A:45:LEU:N 1:A:45:LEU:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CG 20 147.86 (1,656) 1:A:153:LEU:N 1:A:153:LEU:CA 1:A:153:LEU:CB 1:A:153:LEU:CG 20 82.65 (1,240) 1:A:20:LEU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB <t< td=""><td>63.54</td></t<>	63.54
(1,416) 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:CB 1:A:73:PHE:CG 1:A:73:PHE:CD1 20 53.36 (1,369) 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:CB 1:A:58:PHE:CG 1:A:58:PHE:CD1 20 49.7 (1,290) 1:A:35:PHE:CA 1:A:35:PHE:CB 1:A:35:PHE:CG 1:A:35:PHE:CD1 18 34.38 (1,556) 1:A:125:PHE:CA 1:A:125:PHE:CB 1:A:125:PHE:CG 1:A:125:PHE:CD1 20 45.5 (1,316) 1:A:43:LEU:N 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 20 127.34 (1,469) 1:A:91:LEU:N 1:A:45!LEU:CA 1:A:49!LEU:CB 1:A:49!LEU:CG 20 75.9 (1,329) 1:A:45:LEU:N 1:A:45:LEU:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CG 20 147.86 (1,656) 1:A:153:LEU:N 1:A:153:LEU:CA 1:A:153:LEU:CB 1:A:153:LEU:CG 20 82.65 (1,240) 1:A:20:LEU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 20 78.92 (1,552) 1:A:123:ASN:N 1:A:123:ASN:CA 1:A:14:23:ASN:CB	63.41
(1,369) 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:CB 1:A:58:PHE:CG 1:A:58:PHE:CD1 20 49.7 (1,290) 1:A:35:PHE:CA 1:A:35:PHE:CB 1:A:35:PHE:CG 1:A:35:PHE:CD1 18 34.38 (1,556) 1:A:125:PHE:CA 1:A:125:PHE:CB 1:A:125:PHE:CG 1:A:125:PHE:CD1 20 45.5 (1,316) 1:A:43:LEU:N 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 20 127.34 (1,469) 1:A:91:LEU:N 1:A:91:LEU:CA 1:A:49:LEU:CB 1:A:49:LEU:CG 20 75.9 (1,329) 1:A:45:LEU:N 1:A:45:LEU:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CG 20 147.86 (1,656) 1:A:153:LEU:N 1:A:153:LEU:CA 1:A:153:LEU:CB 1:A:153:LEU:CG 20 82.65 (1,240) 1:A:20:LEU:N 1:A:20:LEU:CA 1:A:20:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 20 100.7 (1,226) 1:A:14:LEU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 20 78.92 (1,552) 1:A:123:ASN:N 1:A:126:ASP:CA 1:A:126:ASP:CB	63.13
(1,290) 1:A:35:PHE:CA 1:A:35:PHE:CB 1:A:35:PHE:CG 1:A:35:PHE:CD1 18 34.38 (1,556) 1:A:125:PHE:CA 1:A:125:PHE:CB 1:A:125:PHE:CG 1:A:125:PHE:CD1 20 45.5 (1,316) 1:A:43:LEU:N 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 20 127.34 (1,469) 1:A:91:LEU:N 1:A:491:LEU:CA 1:A:91:LEU:CB 1:A:491:LEU:CG 20 75.9 (1,329) 1:A:45:LEU:N 1:A:45:LEU:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CG 20 147.86 (1,656) 1:A:153:LEU:N 1:A:153:LEU:CA 1:A:153:LEU:CB 1:A:45:LEU:CG 20 82.65 (1,240) 1:A:20:LEU:N 1:A:20:LEU:CA 1:A:20:LEU:CB 1:A:20:LEU:CG 20 100.7 (1,226) 1:A:14:LEU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 20 78.92 (1,552) 1:A:123:ASN:N 1:A:123:ASN:CA 1:A:123:ASN:CB 1:A:123:ASN:CG 20 108.72 (1,558) 1:A:126:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:CB	62.99
(1,556) 1:A:125:PHE:CA 1:A:125:PHE:CB 1:A:125:PHE:CG 1:A:125:PHE:CD1 20 45.5 (1,316) 1:A:43:LEU:N 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 20 127.34 (1,469) 1:A:91:LEU:N 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:CB 1:A:91:LEU:CG 20 75.9 (1,329) 1:A:45:LEU:N 1:A:45:LEU:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CG 20 147.86 (1,656) 1:A:153:LEU:N 1:A:153:LEU:CA 1:A:153:LEU:CB 1:A:153:LEU:CG 20 82.65 (1,240) 1:A:20:LEU:N 1:A:20:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 20 100.7 (1,226) 1:A:14:LEU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 20 78.92 (1,552) 1:A:123:ASN:N 1:A:126:ASP:CA 1:A:126:ASP:CB 1:A:123:ASN:CG 20 108.72 (1,558) 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:CB 1:A:145:ASP:CG 20 59.98 (1,304) 1:A:145:ASP:N 1:A:141:ASP:CA 1:A:141:ASP:CB	62.76
(1,316) 1:A:43:LEU:N 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 20 127.34 (1,469) 1:A:91:LEU:N 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:CB 1:A:91:LEU:CG 20 75.9 (1,329) 1:A:45:LEU:N 1:A:45:LEU:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CG 20 147.86 (1,656) 1:A:153:LEU:N 1:A:153:LEU:CA 1:A:153:LEU:CB 1:A:153:LEU:CG 20 82.65 (1,240) 1:A:20:LEU:N 1:A:20:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:20:LEU:CG 20 100.7 (1,226) 1:A:14:LEU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 20 78.92 (1,552) 1:A:123:ASN:N 1:A:123:ASN:CA 1:A:123:ASN:CB 1:A:123:ASN:CG 20 108.72 (1,558) 1:A:126:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:CB 1:A:145:ASP:CG 19 60.0 (1,630) 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:CB 1:A:145:ASP:CG 20 59.98 (1,304) 1:A:137:ASP:N 1:A:137:ASP:CA 1:A:137:ASP:CB	62.45
(1,469) 1:A:91:LEU:N 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:CB 1:A:91:LEU:CG 20 75.9 (1,329) 1:A:45:LEU:N 1:A:45:LEU:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CG 20 147.86 (1,656) 1:A:153:LEU:N 1:A:153:LEU:CA 1:A:153:LEU:CB 1:A:153:LEU:CG 20 82.65 (1,240) 1:A:20:LEU:N 1:A:20:LEU:CA 1:A:20:LEU:CB 1:A:20:LEU:CG 20 100.7 (1,226) 1:A:14:LEU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 20 78.92 (1,552) 1:A:123:ASN:N 1:A:123:ASN:CA 1:A:123:ASN:CB 1:A:123:ASN:CG 20 108.72 (1,558) 1:A:126:ASP:N 1:A:126:ASP:CA 1:A:126:ASP:CB 1:A:126:ASP:CG 19 60.0 (1,630) 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:CB 1:A:145:ASP:CG 20 59.98 (1,304) 1:A:41:ASP:N 1:A:41:ASP:CA 1:A:41:ASP:CB 1:A:41:ASP:CG 20 80.32 (1,599) 1:A:137:ASP:N 1:A:2:ASP:CA 1:A:137:ASP:CB <th< td=""><td>61.47</td></th<>	61.47
(1,329) 1:A:45:LEU:N 1:A:45:LEU:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CG 20 147.86 (1,656) 1:A:153:LEU:N 1:A:153:LEU:CA 1:A:153:LEU:CB 1:A:153:LEU:CG 20 82.65 (1,240) 1:A:20:LEU:N 1:A:20:LEU:CA 1:A:20:LEU:CB 1:A:20:LEU:CG 20 100.7 (1,226) 1:A:14:LEU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 20 78.92 (1,552) 1:A:123:ASN:N 1:A:123:ASN:CA 1:A:123:ASN:CB 1:A:123:ASN:CG 20 108.72 (1,558) 1:A:126:ASP:N 1:A:126:ASP:CA 1:A:126:ASP:CB 1:A:126:ASP:CG 19 60.0 (1,630) 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:CB 1:A:145:ASP:CG 20 59.98 (1,304) 1:A:41:ASP:N 1:A:41:ASP:CA 1:A:41:ASP:CB 1:A:41:ASP:CG 20 80.32 (1,599) 1:A:137:ASP:N 1:A:137:ASP:CA 1:A:137:ASP:CB 1:A:137:ASP:CG 20 118.96 (1,171) 1:A:2:ASP:N 1:A:155:LEU:CA 1:A:155:LEU:CB	174.7
(1,656) 1:A:153:LEU:N 1:A:153:LEU:CA 1:A:153:LEU:CB 1:A:153:LEU:CG 20 82.65 (1,240) 1:A:20:LEU:N 1:A:20:LEU:CA 1:A:20:LEU:CB 1:A:20:LEU:CG 20 100.7 (1,226) 1:A:14:LEU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 20 78.92 (1,552) 1:A:123:ASN:N 1:A:123:ASN:CA 1:A:123:ASN:CB 1:A:123:ASN:CG 20 108.72 (1,558) 1:A:126:ASP:N 1:A:126:ASP:CA 1:A:126:ASP:CB 1:A:126:ASP:CG 19 60.0 (1,630) 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:CB 1:A:145:ASP:CG 20 59.98 (1,304) 1:A:41:ASP:N 1:A:41:ASP:CA 1:A:41:ASP:CB 1:A:41:ASP:CG 20 80.32 (1,599) 1:A:137:ASP:N 1:A:137:ASP:CA 1:A:137:ASP:CB 1:A:137:ASP:CG 20 118.96 (1,171) 1:A:2:ASP:N 1:A:155:LEU:CA 1:A:155:LEU:CB 1:A:155:LEU:CG 20 75.66	173.6
(1,240) 1:A:20:LEU:N 1:A:20:LEU:CA 1:A:20:LEU:CB 1:A:20:LEU:CG 20 100.7 (1,226) 1:A:14:LEU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 20 78.92 (1,552) 1:A:123:ASN:N 1:A:123:ASN:CA 1:A:123:ASN:CB 1:A:123:ASN:CG 20 108.72 (1,558) 1:A:126:ASP:N 1:A:126:ASP:CA 1:A:126:ASP:CB 1:A:126:ASP:CG 19 60.0 (1,630) 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:CB 1:A:145:ASP:CG 20 59.98 (1,304) 1:A:41:ASP:N 1:A:41:ASP:CA 1:A:41:ASP:CB 1:A:41:ASP:CG 20 80.32 (1,599) 1:A:137:ASP:N 1:A:137:ASP:CA 1:A:137:ASP:CB 1:A:137:ASP:CG 20 118.96 (1,171) 1:A:2:ASP:N 1:A:2:ASP:CA 1:A:2:ASP:CB 1:A:155:LEU:CG 20 75.66	173.4
(1,226) 1:A:14:LEU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 20 78.92 (1,552) 1:A:123:ASN:N 1:A:123:ASN:CA 1:A:123:ASN:CB 1:A:123:ASN:CG 20 108.72 (1,558) 1:A:126:ASP:N 1:A:126:ASP:CA 1:A:126:ASP:CB 1:A:126:ASP:CG 19 60.0 (1,630) 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:CB 1:A:145:ASP:CG 20 59.98 (1,304) 1:A:41:ASP:N 1:A:41:ASP:CA 1:A:41:ASP:CB 1:A:41:ASP:CG 20 80.32 (1,599) 1:A:137:ASP:N 1:A:137:ASP:CA 1:A:137:ASP:CB 1:A:137:ASP:CG 20 118.96 (1,171) 1:A:2:ASP:N 1:A:2:ASP:CA 1:A:2:ASP:CB 1:A:155:LEU:CG 20 75.66 (1,668) 1:A:155:LEU:N 1:A:155:LEU:CA 1:A:155:LEU:CB 1:A:155:LEU:CG 20 75.66	172.2
(1,552) 1:A:123:ASN:N 1:A:123:ASN:CA 1:A:123:ASN:CB 1:A:123:ASN:CG 20 108.72 (1,558) 1:A:126:ASP:N 1:A:126:ASP:CA 1:A:126:ASP:CB 1:A:126:ASP:CG 19 60.0 (1,630) 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:CB 1:A:145:ASP:CG 20 59.98 (1,304) 1:A:41:ASP:N 1:A:41:ASP:CA 1:A:41:ASP:CB 1:A:41:ASP:CG 20 80.32 (1,599) 1:A:137:ASP:N 1:A:137:ASP:CA 1:A:137:ASP:CB 1:A:137:ASP:CG 20 118.96 (1,171) 1:A:2:ASP:N 1:A:2:ASP:CA 1:A:2:ASP:CB 1:A:155:LEU:CG 20 75.66 (1,668) 1:A:155:LEU:N 1:A:155:LEU:CA 1:A:155:LEU:CB 1:A:155:LEU:CG 20 75.66	171.8
(1,558) 1:A:126:ASP:N 1:A:126:ASP:CA 1:A:126:ASP:CB 1:A:126:ASP:CG 19 60.0 (1,630) 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:CB 1:A:145:ASP:CG 20 59.98 (1,304) 1:A:41:ASP:N 1:A:41:ASP:CA 1:A:41:ASP:CB 1:A:41:ASP:CG 20 80.32 (1,599) 1:A:137:ASP:N 1:A:137:ASP:CA 1:A:137:ASP:CB 1:A:137:ASP:CG 20 118.96 (1,171) 1:A:2:ASP:N 1:A:2:ASP:CA 1:A:2:ASP:CB 1:A:2:ASP:CG 20 110.56 (1,668) 1:A:155:LEU:N 1:A:155:LEU:CA 1:A:155:LEU:CB 1:A:155:LEU:CG 20 75.66	171.0
(1,558) 1:A:126:ASP:N 1:A:126:ASP:CA 1:A:126:ASP:CB 1:A:126:ASP:CG 19 60.0 (1,630) 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:CB 1:A:145:ASP:CG 20 59.98 (1,304) 1:A:41:ASP:N 1:A:41:ASP:CA 1:A:41:ASP:CB 1:A:41:ASP:CG 20 80.32 (1,599) 1:A:137:ASP:N 1:A:137:ASP:CA 1:A:137:ASP:CB 1:A:137:ASP:CG 20 118.96 (1,171) 1:A:2:ASP:N 1:A:2:ASP:CA 1:A:2:ASP:CB 1:A:2:ASP:CG 20 110.56 (1,668) 1:A:155:LEU:N 1:A:155:LEU:CA 1:A:155:LEU:CB 1:A:155:LEU:CG 20 75.66	169.3
(1,304) 1:A:41:ASP:N 1:A:41:ASP:CA 1:A:41:ASP:CB 1:A:41:ASP:CG 20 80.32 (1,599) 1:A:137:ASP:N 1:A:137:ASP:CA 1:A:137:ASP:CB 1:A:137:ASP:CG 20 118.96 (1,171) 1:A:2:ASP:N 1:A:2:ASP:CA 1:A:2:ASP:CB 1:A:2:ASP:CG 20 110.56 (1,668) 1:A:155:LEU:N 1:A:155:LEU:CA 1:A:155:LEU:CB 1:A:155:LEU:CG 20 75.66	168.9
(1,599) 1:A:137:ASP:N 1:A:137:ASP:CA 1:A:137:ASP:CB 1:A:137:ASP:CG 20 118.96 (1,171) 1:A:2:ASP:N 1:A:2:ASP:CA 1:A:2:ASP:CB 1:A:2:ASP:CG 20 110.56 (1,668) 1:A:155:LEU:N 1:A:155:LEU:CA 1:A:155:LEU:CB 1:A:155:LEU:CG 20 75.66	167.7
(1,171) 1:A:2:ASP:N 1:A:2:ASP:CA 1:A:2:ASP:CB 1:A:2:ASP:CG 20 110.56 (1,668) 1:A:155:LEU:N 1:A:155:LEU:CA 1:A:155:LEU:CB 1:A:155:LEU:CG 20 75.66	167.2
(1,668) 1:A:155:LEU:N 1:A:155:LEU:CA 1:A:155:LEU:CB 1:A:155:LEU:CG 20 75.66	166.8
	165.4
(1.473) $1 \cdot 4 \cdot 9 \cdot \text{THR} \cdot \text{N}$ $1 \cdot 4 \cdot 9 \cdot \text{THR} \cdot \text{CA}$ $1 \cdot 4 \cdot 9 \cdot \text{THR} \cdot \text{CR}$ $1 \cdot 4 \cdot 9 \cdot \text{THR} \cdot \text{CC}$ $1 \cdot 4 \cdot 9 \cdot 9 \cdot \text{THR} \cdot \text{CC}$ $1 \cdot 4 \cdot 9 \cdot 9 \cdot \text{THR} \cdot \text{CC}$ $1 \cdot 4 \cdot 9 \cdot 9 \cdot \text{THR} \cdot \text{CC}$ $1 \cdot 4 \cdot 9 \cdot 9 \cdot \text{THR} \cdot \text{CC}$ $1 \cdot 4 \cdot 9 \cdot 9 \cdot \text{THR} \cdot \text{CC}$ $1 \cdot 4 \cdot 9 \cdot 9 \cdot \text{THR} \cdot \text{CC}$ $1 \cdot 4 \cdot 9 \cdot 9 \cdot \text{THR} \cdot \text{CC}$ $1 \cdot 4 \cdot 9 \cdot 9 \cdot \text{THR} \cdot \text{CC}$ $1 \cdot 4 \cdot 9 \cdot 9 \cdot \text{THR} \cdot \text{CC}$ $1 \cdot 4 \cdot 9 \cdot 9 \cdot \text{THR} \cdot \text{CC}$ $1 \cdot 4 \cdot 9 \cdot 9 \cdot \text{THR} \cdot \text{CC}$ $1 \cdot 4 \cdot 9 \cdot 9$	164.8
$\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$ $\left[\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right]$ $\left[\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right]$ $\left[\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right]$ $\left[\frac{1}{2}\right]$	164.5
(1,640) 1:A:147:LEU:N 1:A:147:LEU:CA 1:A:147:LEU:CB 1:A:147:LEU:CG 20 82.37	162.7
(1,486) 1:A:101:LEU:N 1:A:101:LEU:CA 1:A:101:LEU:CB 1:A:101:LEU:CG 20 64.59	161.1
(1,592) 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:CB 1:A:136:LEU:CG 20 68.39	160.4
(1,487) 1:A:101:LEU:N 1:A:101:LEU:CA 1:A:101:LEU:CB 1:A:101:LEU:CG 20 95.69	159.7
(1,216) 1:A:11:LEU:N 1:A:11:LEU:CA 1:A:11:LEU:CB 1:A:11:LEU:CG 20 132.42	159.6
(1,669) 1:A:155:LEU:N 1:A:155:LEU:CA 1:A:155:LEU:CB 1:A:155:LEU:CG 20 111.85	159.5
(1,227) 1:A:14:LEU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 20 130.17	159.5
(1,657) 1:A:153:LEU:N 1:A:153:LEU:CA 1:A:153:LEU:CB 1:A:153:LEU:CG 20 94.26	159.0
(1,641) 1:A:147:LEU:N 1:A:147:LEU:CA 1:A:147:LEU:CB 1:A:147:LEU:CG 20 116.63	158.7



Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean (o)	Max (
(1,317)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	20	77.16	157.03
(1,245)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	20	70.81	156.31
(1,593)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	20	97.61	155.87
(1,531)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	20	66.96	155.77
(1,512)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	20	57.47	155.0
(1,223)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	19	52.69	155.0
(1,253)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	20	43.77	154.99
(1,550)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	20	146.46	154.97
(1,323)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	20	83.59	154.93
(1,505)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	20	123.44	154.8
(1,490)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	20	119.82	154.8
(1,175)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	20	103.58	154.8
(1,285)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	20	76.0	154.74
(1,650)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	20	71.78	154.68
(1,681)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	20	92.2	154.67
(1,410)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	20	58.61	154.64
(1,378)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	20	127.72	154.64
(1,571)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	20	89.78	154.63
(1,578)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	20	56.91	154.63
(1,613)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	20	87.69	154.48
(1,256)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	20	105.45	154.43
(1,453)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	20	83.71	154.26
(1,441)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	20	89.54	154.25
(1,470)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	20	90.1	154.14
(1,648)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	20	141.93	154.07
(1,676)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	20	125.72	154.05
(1,207)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	20	37.29	154.03
(1,165)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	20	69.17	153.87
(1,371)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	20	61.01	153.87
(1,308)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	20	80.83	153.44
(1,265)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	20	71.41	153.4
(1,248)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	20	76.74	153.33
(1,530)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	20	130.22	153.2
(1,645)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	20	44.49	153.13
(1,428)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	18	110.12	153.07
(1,188)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	20	47.4	152.95
(1,560)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	20	133.73	152.86
(1,274)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	20	118.73	152.72
(1,261)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	20	51.19	152.41
(1,193)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	20	57.24	152.27
(1,293)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	20	116.13	152.19
(1,346)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	20	98.12	152.18
(1,399)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	20	92.38	152.03
(1,333) $(1,220)$	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	20	63.8	151.76
(1,211)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	20	71.06	151.58
(1,403)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	20	112.5	151.4
(1,100) $(1,241)$	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	20	92.8	151.3
(1,279)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	20	70.0	151.33
(1,533)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	20	117.79	151.32
(1,662)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	20	68.35	150.98
(1,568)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	20	66.85	150.87
(1,500)	1.11.100.010.11	1.71.150.GE0.OA	1.11.100.GE0.OD	1.11.100.010.00		00.00	100.01



Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean (o)	Max (
(1,182)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	20	81.69	150.31
(1,201)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	20	109.66	149.93
(1,411)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	20	113.73	149.92
(1,655)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	20	145.79	149.92
(1,224)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	20	66.85	149.9
(1,569)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	20	67.3	149.87
(1,482)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	20	108.82	149.86
(1,372)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	20	49.98	149.83
(1,324)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	20	89.49	149.74
(1,586)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	20	133.36	149.7
(1,375)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	20	107.5	149.66
(1,236)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	20	67.62	149.63
(1,284)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	20	106.65	149.62
(1,415)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	20	62.02	149.58
(1,296)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	20	76.16	149.54
(1,368)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	20	99.23	149.43
(1,278)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	20	99.5	149.29
(1,176)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	20	59.72	149.22
(1,547)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	20	141.82	149.15
(1,347)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	20	81.6	149.14
(1,259)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	20	71.3	148.86
(1,404)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	20	60.22	148.85
(1,513)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	20	100.38	148.8
(1,254)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	20	64.43	148.76
(1,532)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	20	65.1	148.75
(1,614)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	20	75.12	148.74
(1,521)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	20	88.53	148.73
(1,663)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	20	99.36	148.44
(1,212)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	20	74.54	148.25
(1,221)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	20	87.88	148.23
(1,166)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	20	72.33	148.17
(1,646)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	20	79.06	148.06
(1,576)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	20	104.39	147.92
(1,651)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	20	66.7	147.74
(1,386)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	20	125.66	147.69
(1,442)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	20	78.84	147.26
(1,635)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	20	102.82	147.22
(1,194)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	20	100.11	147.1
(1,294)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	20	79.62	146.92
(1,454)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	20	74.22	146.72
(1,634)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	20	66.18	146.62
(1,429)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	20	52.08	146.45
(1,266)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	20	81.09	145.99
(1,183)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	20	81.81	145.49
(1,526)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	20	86.21	144.97
(1,292)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	20	89.9	144.75
(1,682)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	20	70.56	144.29
(1,539)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	20	112.4	144.18
(1,506)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	20	56.0	143.95
(1,542)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	20	122.9	143.94
(1,300)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	20	108.3	143.89
						0 1: 1	



Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	$\mathbf{Mean} \; (\; \circ \;)$	Max (
(1,414)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	20	47.44	143.38
(1,536)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	20	97.39	143.3
(1,275)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	20	60.51	142.99
(1,555)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	20	96.05	142.8
(1,189)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	20	108.69	142.79
(1,330)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	20	50.15	142.7
(1,520)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	20	64.46	142.73
(1,527)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	20	82.59	142.37
(1,397)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	20	127.41	142.24
(1,400)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	20	48.82	141.59
(1,208)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	20	91.76	141.49
(1,537)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	20	38.19	141.36
(1,289)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	20	121.98	140.83
(1,379)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	20	45.52	140.68
(1,297)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	20	42.01	140.57
(1,249)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	20	85.83	139.94
(1,310)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	20	59.4	139.54
(1,579)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	20	82.62	139.35
(1,309)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	19	51.13	139.25
(1,525)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	20	113.15	138.98
(1,494)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	20	33.99	138.97
(1,200)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	20	35.56	138.34
(1,580)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	20	48.44	137.11
(1,301)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	20	46.24	137.04
(1,463)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	20	64.21	135.35
(1,374)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	20	33.95	135.3
(1,603)	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:CB	1:A:138:ASN:CG	20	54.8	134.63
(1,495)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	20	100.55	134.03
(1,491)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	20	36.42	133.78
(1,523)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	20	34.82	133.06
(1,262)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	20	36.31	130.42
(1,524)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	20	25.99	130.03
(1,554)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	20	63.95	128.66
(1,677)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	20	35.25	127.72
(1,234)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	20	84.09	126.17
(1,585)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	20	46.23	125.92
(1,496)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	20	43.22	125.46
(1,385)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	20	42.58	122.79
(1,474)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	20	31.95	122.47
(1,398)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	20	32.59	120.16
(1,481)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	20	42.25	118.78
(1,288)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	20	52.02	118.62
(1,559)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	20	68.33	117.23
(1,572)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	20	38.27	116.06
(1,548)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	20	102.18	112.77
(1,620)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	20	30.07	105.64
(1,540)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	20	37.91	105.44
(1,465)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	20	35.79	98.63
(1,257)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	20	25.4	93.54
(1,575)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	20	40.57	91.49
(1,543)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	19	32.03	63.34
_ ` ' /		I	I	l .	I.	1	1



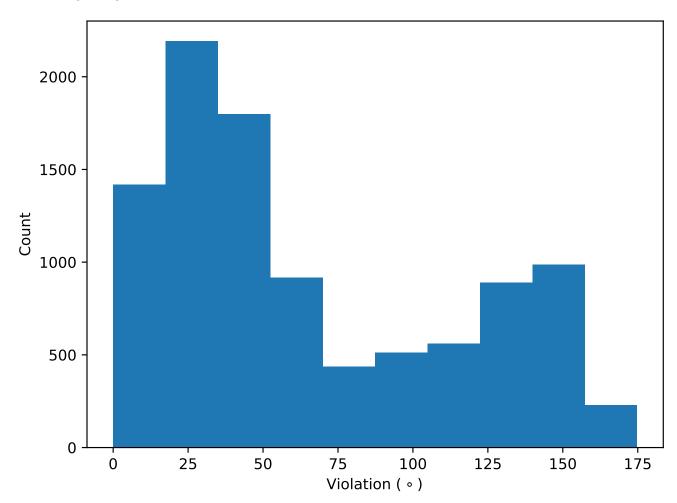
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean (o)	Max (
(1,244)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	20	51.19	62.68
(1,352)	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	20	37.89	56.95
(1,549)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	20	42.18	52.77
(1,551)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	20	41.34	52.45
(1,407)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:CB	1:A:71:VAL:CG1	20	34.29	52.02
(1,217)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	19	35.84	51.09
(1,367)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	20	26.84	47.24
(1,419)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	20	29.71	45.34
(1,258)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	20	29.89	44.21
(1,619)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	20	28.94	43.87
(1,545)	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:CB	1:A:120:VAL:CG1	19	13.4	42.35
(1,649)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	19	23.96	38.81
(1,250)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	20	24.07	38.65
(1,425)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:CB	1:A:77:VAL:CG1	20	28.84	37.98
(1,654)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	20	26.93	36.58
(1,460)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	20	25.61	36.46
(1,516)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	20	24.24	33.76
(1,206)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	20	22.93	32.82
(1,205)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	20	17.07	27.3
(1,517)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	20	15.76	25.31
(1,459)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	20	14.39	24.53
(1,653)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	20	13.07	21.87
(1,235)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	14	5.92	11.11
(1,546)	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:CB	1:A:120:VAL:CG1	10	4.55	10.2
(1,464)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	7	1.69	2.22
(1,475)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	3	1.28	2.03
(1,406)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:CB	1:A:71:VAL:CG1	1	2.02	2.02
(1,437)	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:CB	1:A:81:VAL:CG1	1	0.04	0.04



9.8 All violated dihedral angleeee restraints

9.8.1 Histogram : Distribution of violations

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



9.8.2 Table: All violated dihedral angle restraints

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,316)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	7	174.78
(1,316)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	16	174.2
(1,316)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	4	173.71
(1,469)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1	173.69
(1,469)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	10	173.69
(1,329)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	10	173.49
(1,329)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	8	173.37
(1,329)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	18	173.14
(1,329)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	6	173.05
(1,316)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	5	172.58



	ed from previous pag Atom-1	Atom-2	Atom 2	Atom 4	Model	Violetien (a)
Key			Atom-3	Atom-4		Violation (o)
(1,656)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	16	172.28
(1,329)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	16	172.27
(1,329)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	7	172.1
(1,240)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	4	171.8
(1,329)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	12	171.46
(1,316)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	10	171.17
(1,226)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	17	171.05
(1,316)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	13	170.88
(1,329)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	11	170.46
(1,316)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	8	170.45
(1,329)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	3	170.25
(1,316)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	18	169.9
(1,329)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	19	169.86
(1,656)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	6	169.4
(1,552)	1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:CA	1:A:123:ASN:CB	1:A:123:ASN:CG	19	169.33
(1,558)	1:A:126:ASP:N	1:A:126:ASP:CA	1:A:126:ASP:CB	1:A:126:ASP:CG	9	168.94
(1,316)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	17	167.87
(1,630)	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:CB	1:A:145:ASP:CG	9	167.7
(1,304)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:CB	1:A:41:ASP:CG	1	167.29
(1,329)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	9	167.12
(1,599)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:CB	1:A:137:ASP:CG	14	166.81
(1,329)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	4	166.79
(1,329)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	13	166.66
(1,558)	1:A:126:ASP:N	1:A:126:ASP:CA	1:A:126:ASP:CB	1:A:126:ASP:CG	18	166.13
(1,240)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	12	165.77
(1,304)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:CB	1:A:41:ASP:CG	7	165.53
(1,171)	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:CB	1:A:2:ASP:CG	14	165.42
(1,599)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:CB	1:A:137:ASP:CG	7	165.21
(1,514)	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	1:A:108:GLU:CD	18	164.93
(1,225)	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	1:A:13:GLU:CD	4	164.9
(1,668)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	11	164.88
(1,240)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	17	164.85
(1,522)	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	1:A:110:GLU:CD	10	164.81
(1,348)	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	1:A:49:GLN:CD	5	164.78
(1,195)	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	1:A:6:GLN:CD	7	164.7
(1,184)	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	1:A:4:GLU:CD	4	164.62
(1,636)	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	1:A:146:GLN:CD	14	164.61
(1,213)	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	1:A:10:GLU:CD	2	164.58
(1,473)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	14	164.56
(1,522)	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	1:A:110:GLU:CD	13	164.54
(1,615)	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	1:A:141:GLU:CD	14	164.53
(1,522)	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	1:A:110:GLU:CD	14	164.52
(1,213)	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	1:A:10:GLU:CD	13	164.52
(1,215)	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	1:A:13:GLU:CD	9	164.48
(1,348)	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	1:A:49:GLN:CD	10	164.45
(1,225)	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	1:A:13:GLU:CD	20	164.42
(1,325)	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	1:A:44:GLN:CD	20	164.36
(1,523) $(1,522)$	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	1:A:110:GLU:CD	18	164.33
(1,683)	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	1:A:157:GLU:CD	12	164.31
(1,683)	1:A:157:GLU:CA 1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	1:A:157:GLU:CD	2	164.24
(1,636)	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	1:A:146:GLN:CD	6	164.22
(1,050)	1.A:140:GLN:CA	1.A:140:GLN:CB	1.A:140:GLN:UG	1.A.140.GLN:CD		104.22



	ed from previous page		A	A 1 4	N.F. 1.1	T 7* 1 (* ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,430)	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	1:A:78:GLU:CD	5	164.21
(1,683)	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	1:A:157:GLU:CD	6	164.12
(1,260)	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	1:A:25:GLN:CD	11	164.12
(1,348)	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	1:A:49:GLN:CD	6	164.06
(1,195)	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	1:A:6:GLN:CD	2	163.88
(1,195)	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	1:A:6:GLN:CD	4	163.86
(1,514)	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	1:A:108:GLU:CD	6	163.81
(1,276)	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	1:A:30:GLU:CD	9	163.78
(1,295)	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	1:A:36:GLU:CD	10	163.73
(1,184)	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	1:A:4:GLU:CD	15	163.73
(1,683)	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	1:A:157:GLU:CD	11	163.61
(1,656)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	7	163.57
(1,295)	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	1:A:36:GLU:CD	9	163.55
(1,348)	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	1:A:49:GLN:CD	20	163.53
(1,225)	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	1:A:13:GLU:CD	6	163.53
(1,430)	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	1:A:78:GLU:CD	11	163.48
(1,412)	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	1:A:72:GLU:CD	6	163.39
(1,405)	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	1:A:70:GLU:CD	2	163.38
(1,225)	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	1:A:13:GLU:CD	5	163.25
(1,325)	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	1:A:44:GLN:CD	13	163.19
(1,577)	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	1:A:133:GLU:CD	3	163.18
(1,636)	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	1:A:146:GLN:CD	2	163.05
(1,636)	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	1:A:146:GLN:CD	15	162.94
(1,213)	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	1:A:10:GLU:CD	11	162.9
(1,213)	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	1:A:10:GLU:CD	16	162.84
(1,570)	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	1:A:130:GLU:CD	3	162.81
(1,430)	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	1:A:78:GLU:CD	19	162.8
(1,570)	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	1:A:130:GLU:CD	6	162.75
(1,514)	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	1:A:108:GLU:CD	3	162.74
(1,640)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	13	162.71
(1,577)	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	1:A:133:GLU:CD	17	162.6
(1,443)	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	1:A:82:GLU:CD	17	162.59
(1,276)	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	1:A:30:GLU:CD	20	162.52
(1,514)	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	1:A:108:GLU:CD	20	162.51
(1,213)	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	1:A:10:GLU:CD	3	162.45
(1,213)	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	1:A:10:GLU:CD	10	162.38
(1,348)	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	1:A:49:GLN:CD	12	162.3
(1,636)	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	1:A:146:GLN:CD	11	162.26
(1,260)	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	1:A:25:GLN:CD	8	162.23
(1,316)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	12	162.2
(1,171)	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:CB	1:A:2:ASP:CG	8	162.2
(1,577)	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	1:A:133:GLU:CD	12	162.12
(1,577)	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	1:A:133:GLU:CD	1	162.11
(1,599)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:CB	1:A:137:ASP:CG	9	162.02
(1,514)	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	1:A:108:GLU:CD	8	161.99
(1,570)	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	1:A:130:GLU:CD	18	161.98
(1,213)	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	1:A:10:GLU:CD	9	161.97
(1,514)	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	1:A:108:GLU:CD	13	161.85
, , ,	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	1:A:44:GLN:CD	10	161.84
(1,325)						
(1,325) $(1,636)$	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	1:A:146:GLN:CD	12	161.81



	ed from previous pag		A		36 11	T71 1
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,405)	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	1:A:70:GLU:CD	12	161.78
(1,184)	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	1:A:4:GLU:CD	1	161.74
(1,443)	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	1:A:82:GLU:CD	9	161.67
(1,225)	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	1:A:13:GLU:CD	1	161.67
(1,213)	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	1:A:10:GLU:CD	17	161.64
(1,295)	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	1:A:36:GLU:CD	19	161.6
(1,514)	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	1:A:108:GLU:CD	9	161.53
(1,348)	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	1:A:49:GLN:CD	19	161.53
(1,184)	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	1:A:4:GLU:CD	12	161.45
(1,615)	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	1:A:141:GLU:CD	11	161.42
(1,514)	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	1:A:108:GLU:CD	16	161.35
(1,225)	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	1:A:13:GLU:CD	17	161.32
(1,240)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	20	161.25
(1,636)	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	1:A:146:GLN:CD	9	161.24
(1,329)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	17	161.21
(1,195)	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	1:A:6:GLN:CD	9	161.19
(1,683)	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	1:A:157:GLU:CD	10	161.13
(1,486)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	19	161.13
(1,276)	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	1:A:30:GLU:CD	11	161.11
(1,577)	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	1:A:133:GLU:CD	16	161.03
(1,184)	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	1:A:4:GLU:CD	16	161.02
(1,683)	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	1:A:157:GLU:CD	3	161.01
(1,225)	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	1:A:13:GLU:CD	3	161.0
(1,577)	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	1:A:133:GLU:CD	15	160.95
(1,412)	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	1:A:72:GLU:CD	17	160.92
(1,412)	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	1:A:72:GLU:CD	4	160.88
(1,636)	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	1:A:146:GLN:CD	8	160.78
(1,295)	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	1:A:36:GLU:CD	8	160.7
(1,276)	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	1:A:30:GLU:CD	6	160.66
(1,514)	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	1:A:108:GLU:CD	19	160.55
(1,592)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	3	160.45
(1,412)	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	1:A:72:GLU:CD	1	160.45
(1,276)	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	1:A:30:GLU:CD	1	160.4
(1,325)	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	1:A:44:GLN:CD	1	160.39
(1,195)	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	1:A:6:GLN:CD	17	160.38
(1,443)	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	1:A:82:GLU:CD	11	160.36
(1,522)	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	1:A:110:GLU:CD	20	160.31
(1,260)	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	1:A:25:GLN:CD	10	160.3
(1,636)	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	1:A:146:GLN:CD	20	160.29
(1,348)	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	1:A:49:GLN:CD	18	160.29
(1,405)	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	1:A:70:GLU:CD	11	160.26
(1,276)	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	1:A:30:GLU:CD	12	160.26
(1,405)	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	1:A:70:GLU:CD	15	160.21
(1,195)	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	1:A:6:GLN:CD	10	160.12
(1,514)	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	1:A:108:GLU:CD	1	160.12
(1,314) $(1,412)$	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	1:A:72:GLU:CD	13	160.1
(1,412) $(1,276)$	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	1:A:30:GLU:CD	7	160.07
(1,270) $(1,195)$	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	1:A:6:GLN:CD	20	160.04
(1,195) $(1,295)$	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	1:A:36:GLU:CD	6	159.97
(1,260)	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	1:A:25:GLN:CD	4	159.88
(1,200) $(1,412)$	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	1:A:72:GLU:CD	19	159.81
(1,414)	1.A.12.GLU.UA	1.A.12.GLU:UD	1.A.12.GLU.UG	1.A.12.GLU:OD		109.01



	ed from previous pag		A	A 1 4	3.6 1.1	T 7* 1 4* ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,487)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	15	159.75
(1,260)	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	1:A:25:GLN:CD	17	159.72
(1,213)	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	1:A:10:GLU:CD	20	159.64
(1,216)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	14	159.6
(1,348)	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	1:A:49:GLN:CD	2	159.59
(1,329)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	5	159.58
(1,669)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1	159.57
(1,276)	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	1:A:30:GLU:CD	10	159.56
(1,227)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1	159.53
(1,225)	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	1:A:13:GLU:CD	16	159.51
(1,522)	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	1:A:110:GLU:CD	5	159.49
(1,276)	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	1:A:30:GLU:CD	3	159.46
(1,276)	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	1:A:30:GLU:CD	17	159.44
(1,487)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	17	159.41
(1,171)	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:CB	1:A:2:ASP:CG	17	159.39
(1,577)	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	1:A:133:GLU:CD	2	159.38
(1,443)	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	1:A:82:GLU:CD	3	159.31
(1,615)	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	1:A:141:GLU:CD	2	159.29
(1,473)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	10	159.28
(1,443)	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	1:A:82:GLU:CD	13	159.16
(1,430)	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	1:A:78:GLU:CD	4	159.15
(1,577)	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	1:A:133:GLU:CD	10	159.11
(1,552)	1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:CA	1:A:123:ASN:CB	1:A:123:ASN:CG	20	159.11
(1,657)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	10	159.07
(1,522)	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	1:A:110:GLU:CD	11	159.07
(1,412)	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	1:A:72:GLU:CD	14	159.03
(1,295)	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	1:A:36:GLU:CD	5	159.0
(1,473)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	19	158.91
(1,683)	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	1:A:157:GLU:CD	20	158.81
(1,487)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	3	158.81
(1,260)	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	1:A:25:GLN:CD	13	158.77
(1,641)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	8	158.76
(1,195)	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	1:A:6:GLN:CD	5	158.73
(1,316)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	6	158.66
(1,487)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	16	158.64
(1,325)	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	1:A:44:GLN:CD	17	158.64
(1,636)	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	1:A:146:GLN:CD	17	158.59
(1,577)	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	1:A:133:GLU:CD	13	158.59
(1,184)	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	1:A:4:GLU:CD	5	158.54
(1,599)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:CB	1:A:137:ASP:CG	1	158.53
(1,683)	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	1:A:157:GLU:CD	13	158.52
(1,636)	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	1:A:146:GLN:CD	4	158.41
(1,570)	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	1:A:130:GLU:CD	11	158.4
(1,599)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:CB	1:A:137:ASP:CG	4	158.38
(1,570)	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	1:A:130:GLU:CD	5	158.31
(1,329)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	14	158.29
(1,522)	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	1:A:110:GLU:CD	17	158.23
(1,260)	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	1:A:25:GLN:CD	3	158.22
(1,683)	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	1:A:157:GLU:CD	9	158.17
(1,276)	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	1:A:30:GLU:CD	2	158.17
(1,570)	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	1:A:130:GLU:CD	10	158.13
(+,010)	1.11.130.0110.011			1.1.1.100.010.01		od on next nage



	ed from previous pag Atom-1	Atom-2	Atom 2	Atom 1	Model	Violation (o)
Key			Atom-3	Atom-4		· ,
(1,171)	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:CB	1:A:2:ASP:CG	11	158.09
(1,577)	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	1:A:133:GLU:CD	5	158.05
(1,184)	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	1:A:4:GLU:CD	10	158.05
(1,171)	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:CB	1:A:2:ASP:CG	19	158.05
(1,473)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	20	157.97
(1,669)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	16	157.96
(1,213)	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	1:A:10:GLU:CD	14	157.84
(1,430)	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	1:A:78:GLU:CD	20	157.69
(1,405)	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	1:A:70:GLU:CD	20	157.65
(1,669)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	20	157.6
(1,636)	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	1:A:146:GLN:CD	7	157.59
(1,195)	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	1:A:6:GLN:CD	12	157.47
(1,656)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	15	157.4
(1,641)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	10	157.4
(1,260)	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	1:A:25:GLN:CD	14	157.37
(1,412)	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	1:A:72:GLU:CD	7	157.29
(1,577)	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	1:A:133:GLU:CD	11	157.25
(1,552)	1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:CA	1:A:123:ASN:CB	1:A:123:ASN:CG	1	157.24
(1,615)	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	1:A:141:GLU:CD	17	157.23
(1,522)	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	1:A:110:GLU:CD	6	157.18
(1,213)	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	1:A:10:GLU:CD	1	157.16
(1,276)	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	1:A:30:GLU:CD	15	157.12
(1,317)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	15	157.03
(1,348)	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	1:A:49:GLN:CD	8	156.92
(1,570)	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	1:A:130:GLU:CD	7	156.85
(1,570)	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	1:A:130:GLU:CD	12	156.85
(1,412)	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	1:A:72:GLU:CD	15	156.81
(1,552)	1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:CA	1:A:123:ASN:CB	1:A:123:ASN:CG	3	156.59
(1,486)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	2	156.48
(1,683)	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	1:A:157:GLU:CD	16	156.45
(1,514)	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	1:A:108:GLU:CD	7	156.45
(1,213)	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	1:A:10:GLU:CD	12	156.41
(1,195)	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	1:A:6:GLN:CD	6	156.38
(1,443)	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	1:A:82:GLU:CD	7	156.36
(1,514)	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	1:A:108:GLU:CD	4	156.32
(1,245)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	9	156.31
(1,317)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	2	156.22
(1,443)	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	1:A:82:GLU:CD	1	156.2
(1,412)	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	1:A:72:GLU:CD	5	156.16
(1,577)	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	1:A:133:GLU:CD	20	156.15
(1,216)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	10	156.07
(1,514)	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	1:A:108:GLU:CD	17	156.05
(1,683)	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	1:A:157:GLU:CD	19	156.04
(1,213)	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	1:A:10:GLU:CD	18	156.04
(1,615)	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	1:A:141:GLU:CD	8	156.01
(1,348)	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	1:A:49:GLN:CD	1	155.99
(1,641)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	16	155.94
(1,171)	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:CB	1:A:2:ASP:CG	5	155.9
(1,599)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:CB	1:A:137:ASP:CG	11	155.87
(1,593)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	19	155.87
(1,615)	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	1:A:141:GLU:CD	9	155.82
(+,0+0)	1111.0110.011			1		od on nort nage



Key	$egin{array}{c} ext{ed from previous pag} \ ext{ } ext{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,325)	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	1:A:44:GLN:CD	9	155.78
(1,531)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	12	155.77
(1,577)	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	1:A:133:GLU:CD	8	155.72
(1,325)	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	1:A:44:GLN:CD	7	155.69
(1,522)	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	1:A:110:GLU:CD	19	155.63
(1,213)	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	1:A:10:GLU:CD	4	155.57
(1,325)	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	1:A:44:GLN:CD	6	155.42
(1,184)	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	1:A:4:GLU:CD	7	155.4
(1,213)	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	1:A:10:GLU:CD	5	155.37
(1,443)	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	1:A:82:GLU:CD	12	155.31
(1,295)	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	1:A:36:GLU:CD	2	155.29
(1,599)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:CB	1:A:137:ASP:CG	12	155.24
(1,213)	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	1:A:10:GLU:CD	7	155.12
(1,412)	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	1:A:72:GLU:CD	3	155.07
(1,514)	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	1:A:108:GLU:CD	12	155.06
(1,171)	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:CB	1:A:2:ASP:CG	18	155.03
(1,512)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	14	155.0
(1,223)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	16	155.0
(1,295)	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	1:A:36:GLU:CD	7	154.99
(1,253)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	1	154.99
(1,550)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	18	154.97
(1,636)	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	1:A:146:GLN:CD	13	154.96
(1,323)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	11	154.93
(1,325) $(1,245)$	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	15	154.91
(1,184)	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	1:A:4:GLU:CD	9	154.91
(1,505)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	20	154.8
(1,490)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	8	154.8
(1,175)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	4	154.8
(1,599)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:CB	1:A:137:ASP:CG	3	154.74
(1,550)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	9	154.74
(1,285)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	15	154.74
(1,650)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	5	154.68
(1,681)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	14	154.67
(1,550)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	19	154.67
(1,512)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	17	154.65
(1,304)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:CB	1:A:41:ASP:CG	3	154.65
(1,410)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	18	154.64
(1,378)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	9	154.64
(1,578)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	20	154.63
(1,570)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	9	154.63
(1,669)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	13	154.56
(1,505)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	14	154.52
(1,613)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	11	154.48
(1,640)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	11	154.46
(1,412)	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	1:A:72:GLU:CD	11	154.43
(1,256)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	18	154.43
(1,443)	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	1:A:82:GLU:CD	18	154.36
(1,348)	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	1:A:49:GLN:CD	3	154.35
(1,175)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	9	154.35
(1,184)	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	1:A:4:GLU:CD	11	154.32
(1,453)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	13	154.26
(1,100)	1.11.00.1110.11	1.11.00.1110.011	1.11.00.1110.01	1.11.00.11160.00		ed on nert nage



Key	$\frac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,227)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	20	154.26
(1,227) $(1,441)$	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	18	154.25
(1,441) $(1,216)$	1:A:11:LEU:N	1:A:02:GLU:CA 1:A:11:LEU:CA	1:A:32:GLU:CB	1:A:11:LEU:CG	5	154.25
(1,216) $(1,216)$	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA 1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1	154.24
(1,210) $(1,550)$	1:A:11:LEU:N 1:A:122:ASP:N	1:A:11:LEO:CA 1:A:122:ASP:CA	1:A:11:LEU:CB 1:A:122:ASP:CB	1:A:11:LEU:CG 1:A:122:ASP:CG	13	154.22
(1,330) $(1,276)$	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	1:A:30:GLU:CD	8	154.22
(1,270) $(1,571)$	1:A:132:TYR:N	1:A:30:GLU:CB 1:A:132:TYR:CA	1:A:30:GLU:CG 1:A:132:TYR:CB	1:A:30:GLU:CD 1:A:132:TYR:CG	5	154.18
(1,371) $(1,470)$	1:A:91:LEU:N	1:A:132:11 R:CA 1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	7	154.14
(1,470) $(1,490)$	1:A:102:TYR:N	1:A:91:LEO:CA 1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:91:LEU:CG 1:A:102:TYR:CG	7	154.14
(1,490) $(1,648)$	1:A:102:11 R:N 1:A:149:THR:N	1:A:102:11R:CA 1:A:149:THR:CA	1:A:102:11R:CB 1:A:149:THR:CB	1:A:102:11R:CG 1:A:149:THR:OG1	13	154.07
(1,676)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	11	154.05
(1,670) $(1,630)$	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:CB	1:A:145:ASP:CG	14	154.05
(1,030) $(1,207)$	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	13	154.03
(1,207) $(1,216)$	1:A:9:C 15:N 1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	12	154.03
(1,681)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	9	154.02
· · /	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	10	154.01
(1,490)	1:A:102:1 1 K:N 1:A:2:ASP:N	1:A:102:1 1 K:CA 1:A:2:ASP:CA	1:A:102:11R:CB 1:A:2:ASP:CB	1:A:102:114 K:CG 1:A:2:ASP:CG	12	153.99
(1,171)	1:A:2:A5F:N 1:A:134:ILE:N	1:A:2:ASP:CA 1:A:134:ILE:CA	1:A:2:ASP:CB 1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	5	153.98
(1,578)		1:A:154:1LE:CA 1:A:25:GLN:CB			12	
(1,260)	1:A:25:GLN:CA 1:A:24:THR:N	1:A:25:GLN:CB 1:A:24:THR:CA	1:A:25:GLN:CG	1:A:25:GLN:CD		153.97
(1,256)			1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	16	153.97
(1,171)	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA 1:A:9:CYS:CA	1:A:2:ASP:CB	1:A:2:ASP:CG	9	153.97
(1,207)	1:A:9:CYS:N		1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	16	153.95
(1,410)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	20	153.91
(1,378)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	16 3	153.9
(1,490)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG		153.89
(1,378)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	10	153.89
(1,371)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	2	153.87
(1,165)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	6	153.87
(1,348)	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	1:A:49:GLN:CD	16	153.84
(1,256)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	14	153.81
(1,571)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	6	153.8
(1,405)	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	1:A:70:GLU:CD	1	153.8
(1,316)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	3	153.8
(1,550)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	2	153.75
(1,260)	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	1:A:25:GLN:CD	18	153.75
(1,348)	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	1:A:49:GLN:CD	9	153.72
(1,175)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	6	153.7
(1,650)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	10	153.65
(1,550)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	12	153.64
(1,681)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	7	153.59
(1,371)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	13	153.59
(1,223)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	6	153.55
(1,641)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	3	153.52
(1,648)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	1	153.49
(1,505)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	4	153.45
(1,227)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	7	153.45
(1,648)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	16	153.44
(1,308)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	13	153.44
(1,265)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	4	153.4
(1,223)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	20	153.39
(1,248)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	2	153.33



	ed from previous pag		A	A	3.6 1.1	T 70 1 10 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,657)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	3	153.3
(1,490)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	13	153.24
(1,253)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	15	153.24
(1,412)	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	1:A:72:GLU:CD	8	153.23
(1,676)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	12	153.22
(1,530)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	20	153.2
(1,636)	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	1:A:146:GLN:CD	3	153.15
(1,645)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	9	153.13
(1,552)	1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:CA	1:A:123:ASN:CB	1:A:123:ASN:CG	5	153.07
(1,428)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	4	153.07
(1,676)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	16	153.06
(1,571)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	11	153.04
(1,405)	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	1:A:70:GLU:CD	8	153.0
(1,227)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	6	152.98
(1,175)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	2	152.98
(1,641)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	6	152.97
(1,412)	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	1:A:72:GLU:CD	2	152.95
(1,188)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	19	152.95
(1,650)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	13	152.89
(1,669)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	2	152.86
(1,613)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	14	152.86
(1,560)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	11	152.86
(1,487)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	4	152.86
(1,657)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	11	152.82
(1,550)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	17	152.82
(1,378)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	5	152.8
(1,216)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	6	152.8
(1,405)	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	1:A:70:GLU:CD	19	152.79
(1,615)	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	1:A:141:GLU:CD	1	152.78
(1,285)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	14	152.73
(1,308)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1	152.72
(1,274)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	20	152.72
(1,676)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	2	152.7
(1,274)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	11	152.58
(1,378)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	3	152.57
(1,378)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	12	152.57
(1,323)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	2	152.51
(1,216)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	2	152.51
(1,578)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1	152.47
(1,530)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	4	152.47
(1,378)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	20	152.45
(1,577)	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	1:A:133:GLU:CD	19	152.43
(1,274)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	2	152.43
(1,261)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	8	152.41
(1,676)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	1	152.39
(1,248)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	5	152.39
(1,378)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	17	152.35
` ′	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	1:A:82:GLU:CD	16	152.34
, ,						
· · /					1	
(1,681)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	17	152.31
(1,443) $(1,512)$ $(1,248)$	1:A:108:GLU:N 1:A:22:ILE:N	1:A:108:GLU:CA 1:A:22:ILE:CA	1:A:108:GLU:CB 1:A:22:ILE:CB	1:A:108:GLU:CG 1:A:22:ILE:CG1	9	152.33 152.33



Key	$egin{array}{c} ext{ed from previous pag} \ ext{ } ext{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,505)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	6	152.31
(1,571)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	14	152.29
(1,193)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	16	152.27
(1,577)	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	1:A:133:GLU:CD	4	152.25
(1,216)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	20	152.23
(1,165)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	19	152.23
(1,441)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	1	152.22
(1,248)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	8	152.22
(1,216)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	4	152.22
(1,490)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	17	152.21
(1,293)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	14	152.19
(1,346)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	16	152.18
(1,669)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	12	152.15
(1,348)	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	1:A:49:GLN:CD	7	152.14
(1,165)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	5	152.12
(1,530)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	17	152.05
(1,399)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	19	152.03
(1,171)	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:CB	1:A:2:ASP:CG	3	151.95
(1,175)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	13	151.93
(1,179) $(1,428)$	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	8	151.81
(1,530)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	18	151.79
(1,570)	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	1:A:130:GLU:CD	16	151.78
(1,308)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	19	151.76
(1,300) $(1,220)$	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	2	151.76
(1,220) $(1,216)$	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	8	151.75
(1,210) $(1,514)$	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	1:A:108:GLU:CD	11	151.75
(1,314) $(1,405)$	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	1:A:70:GLU:CD	4	151.7
(1,405) $(1,195)$	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	1:A:6:GLN:CD	1	151.7
(1,195) $(1,245)$	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	8	151.69
(1,243) $(1,681)$	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	6	151.68
(1,031) $(1,348)$	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	1:A:49:GLN:CD	13	151.66
(1,681)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	18	151.64
(1,001) $(1,570)$	1:A:130:GLU:CA	1:A:137:GLU:CA 1:A:130:GLU:CB	1:A:137:GLU:CB 1:A:130:GLU:CG	1:A:130:GLU:CD	20	151.63
(1,370) $(1,428)$	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	17	151.62
(, ,	1:A:122:ASP:N	1:A:78:GLU:CA 1:A:122:ASP:CA	1:A:78:GLU:CB 1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	16	
(1,550)		1:A:122:A5F:CA 1:A:42:ILE:CA				151.6
(1,308)	1:A:42:ILE:N 1:A:10:GLU:N		1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	9	151.58
(1,211)		1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG		151.58
(1,412)	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	1:A:72:GLU:CD	20	151.46
(1,225)	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	1:A:13:GLU:CD	19	151.45
(1,560)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	15	151.43
(1,403)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	12	151.4
(1,560)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1	151.38
(1,522)	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	1:A:110:GLU:CD	16	151.38
(1,279)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	9	151.33
(1,241)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	2	151.33
(1,533)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	11	151.32
(1,227)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	15	151.31
(1,676)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	13	151.29
(1,274)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	12	151.24
(1,615)	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	1:A:141:GLU:CD	15	151.15
(1,550)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	11	151.14



Key	$egin{array}{c} ext{ed from previous pag} \ ext{ } ext{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,530)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	3	151.12
(1,641)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	15	151.09
(1,676)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	8	151.08
(1,650)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	8	151.08
(1,578)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	16	151.05
(1,428)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	11	151.02
(1,378)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	4	151.01
(1,662)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	19	150.98
(1,428)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	6	150.94
(1,175)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	18	150.94
(1,593)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	5	150.93
(1,505)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	9	150.92
(1,599)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:CB	1:A:137:ASP:CG	17	150.89
(1,560)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	7	150.89
(1,568)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	18	150.87
(1,550)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	14	150.87
(1,256)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	12	150.81
(1,323)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	20	150.78
(1,378)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	2	150.73
(1,325)	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	1:A:44:GLN:CD	12	150.73
(1,522)	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	1:A:110:GLU:CD	15	150.62
(1,260)	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	1:A:25:GLN:CD	15	150.59
(1,193)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	9	150.58
(1,676)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	18	150.57
(1,265)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	3	150.57
(1,648)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	17	150.53
(1,403)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	19	150.53
(1,248)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	20	150.51
(1,470)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	5	150.5
(1,378)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	13	150.49
(1,533)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	3	150.41
(1,175)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	17	150.38
(1,570)	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	1:A:130:GLU:CD	8	150.37
(1,648)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	12	150.36
(1,570)	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	1:A:130:GLU:CD	9	150.35
(1,550)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	10	150.35
(1,260)	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	1:A:25:GLN:CD	20	150.34
(1,193)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	8	150.33
(1,490)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	14	150.31
(1,182)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	6	150.31
(1,593)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	13	150.3
(1,441)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	20	150.3
(1,428)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	14	150.29
(1,441)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	9	150.21
(1,593)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	12	150.1
(1,530)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	2	150.1
(1,182)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	5	150.08
(1,378)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	1	150.06
(1,240)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	11	150.06
(1,265)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	14	150.01
(1,216)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	11	149.97



Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,676)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	14	149.95
(1,201)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	16	149.93
(1,655)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	17	149.92
(1,411)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	11	149.92
(1,224)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	7	149.9
(1,681)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	15	149.89
(1,569)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	4	149.87
(1,482)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	11	149.86
(1,332)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	7	149.85
(1,550)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	15	149.83
(1,372)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	16	149.83
(1,662)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	2	149.82
(1,274)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	1	149.81
(1,324)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	10	149.74
(1,274)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	15	149.74
(1,669)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	8	149.71
(1,586)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	19	149.7
(1,586)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	3	149.66
(1,375)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	15	149.66
(1,533)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	6	149.65
(1,256)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	20	149.65
(1,236)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	17	149.63
(1,223)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	19	149.63
(1,284)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1	149.62
(1,655)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	19	149.61
(1,490)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	20	149.6
(1,284)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	12	149.6
(1,428)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	20	149.59
(1,453)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	1	149.58
(1,415)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	14	149.58
(1,236)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	13	149.55
(1,182)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	20	149.55
(1,296)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	8	149.54
(1,182)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	16	149.54
(1,655)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	6	149.53
(1,657)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	5	149.52
(1,371)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	5	149.48
(1,681)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	11	149.47
(1,405)	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	1:A:70:GLU:CD	17	149.47
(1,668)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	15	149.46
(1,411)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	7	149.43
(1,368)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	2	149.43
(1,569)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	17	149.42
(1,403)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	17	149.42
(1,453)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	5	149.4
(1,648)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	3	149.36
(1,236)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	20	149.32
(1,278)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	7	149.29
(1,550)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	8	149.28
(1,403)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	2	149.27
	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	16	149.27



14.236	Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
	(1,236)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	2	149.26
10.176	· · /	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	3	149.23
(1,375)	` ' /	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	14	
1.1.256 1.4.242THRN	/	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG		149.19
(1,216) 1-A;11-LEUCN	/	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	8	149.19
	/	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	16	149.18
	/	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	18	149.15
1,201	/	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	19	149.15
(1,201) 1:A:7-PHE:N 1:A:7-PHE:CA 1:A:7-PHE:CB 1:A:7-PHE:CG 5 149.16 (1,278) 1:A:31:LEU:N 1:A:31:LEU:CA 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CG 3 149.06 (1,403) 1:A:70:GUU:CA 1:A:70:GUU:CA 1:A:70:GUU:CB 5.470:GUU:CB 5.4	· · /	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	10	149.14
	· · /	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	5	149.14
1,4270 1;A;70;GLU;N	· · /	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	3	149.06
(1,411)	(' /	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG		
(1,641) 1:A:147:LEU:N	(1,236)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	3	149.05
(1,641) 1:A:147:LEU:N	(' /	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	4	
(1,211)	` ' /					18	
(1,165) 1:A:1:MET:N	(/ /	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	18	
(1,640) 1:A:147;LEU:N 1:A:147;LEU:CA 1:A:147;LEU:CB 1:A:147;LEU:CG 20 148.92 (1,669) 1:A:155;LEU:N 1:A:155;LEU:CA 1:A:155;LEU:CB 1:A:155;LEU:CG 6 148.88 (1,613) 1:A:141;GLU:N 1:A:141;GLU:CA 1:A:141;GLU:CB 1:A:155;GLN:CG 15 148.86 (1,239) 1:A:25;GLN:N 1:A:25;GLN:CA 1:A:25;GLN:CB 1:A:25;GLN:CG 12 148.86 (1,236) 1:A:17;VAL:CA 1:A:17;VAL:CB 1:A:17;VAL:CG1 9 148.86 (1,404) 1:A:70;GLU:N 1:A:17;VAL:CA 1:A:17;VAL:CB 1:A:17;VAL:CG 9 148.86 (1,404) 1:A:70;GLU:N 1:A:13;GLU:CA 1:A:13;GLU:CB 1:A:17;VAL:CG 19 148.85 (1,244) 1:A:13;GLU:N 1:A:13;GLU:CA 1:A:13;GLU:CB 1:A:154;MET:CG 11 148.84 (1,662) 1:A:14;GLU:N 1:A:106;GLU:CA 1:A:106;TYR:CB 1:A:106;TYR:CB 1:A:106;TYR:CG 1 1:A:18.81 (1,513) 1:A:13;GLU:N 1:A:108;GLU:CA 1:A:106;GLU:CB	(/ /		1:A:1:MET:CA				
(1,669) 1:A:155:LEU:N 1:A:155:LEU:CA 1:A:155:LEU:CB 1:A:155:LEU:CG 6 148.88 (1,613) 1:A:141:GLU:N 1:A:141:GLU:CA 1:A:141:GLU:CB 1:A:141:GLU:CG 15 148.86 (1,259) 1:A:25:GLN:N 1:A:25:GLN:CA 1:A:25:GLN:CB 1:A:25:GLN:CG 12 148.86 (1,236) 1:A:17:VAL:N 1:A:17:VAL:CA 1:A:17:VAL:CB 1:A:17:VAL:CG1 9 148.86 (1,404) 1:A:70:GLU:N 1:A:70:GLU:CA 1:A:17:VAL:CB 1:A:17:VAL:CG1 9 148.86 (1,404) 1:A:70:GLU:N 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:CB 1:A:13:GLU:CG 11 148.85 (1,224) 1:A:13:GLU:N 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:CB 1:A:13:GLU:CG 11 148.84 (1,662) 1:A:154:MET:N 1:A:154:MET:CA 1:A:154:MET:CB 1:A:154:MET:CG 18 148.83 (1,505) 1:A:106:TYR:N 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:CB 1:A:108:GLU:CG 7 148.83 (1,513) 1:A:106:GU:N 1:A:108:GLU:CA 1:A:108:GLU:CB 1:A:108:GLU:CG 5 148.88 (1,533) 1:A:116:LEU:N 1:A:116:LEU:CA 1:A:116:LEU:CB 1:A:116:LEU:CG 8 148.78 (1,657) 1:A:153:LEU:N 1:A:153:LEU:CB 1:A:116:LEU:CB 1:A:153:LEU:CB 20 148.76 (1,522) 1:A:110:GLU:CA 1:A:110:GLU:CB 1:A:110:GLU:CD 3 148.76 (1,524) 1:A:23:ARG:N 1:A:23:ARG:CA 1:A:23:ARG:CB 1:A:23:ARG:CG 14 148.76 (1,532) 1:A:116:LEU:N 1:A:16:LEU:CA 1:A:16:LEU:CB 1:A:16:LEU:CG 9 148.75 (1,428) 1:A:78:GLU:N 1:A:13:GLU:CA 1:A:16:LEU:CB 1:A:16:LEU:CG 3 148.75 (1,428) 1:A:13:GLU:N 1:A:16:LEU:CA 1:A:16:LEU:CB 1:A:16:LEU:CG 17 148.74 (1,521) 1:A:110:GLU:N 1:A:110:GLU:CA 1:A:110:GLU:CB 1:A:110:GLU:CG 1 148.75 (1,428) 1:A:13:GLU:N 1:A:14:GLU:CA 1:A:14:GLU:CB 1:A:15:VAL:CG 1 148.75 (1,648) 1:A:13:GLU:N 1:A:16:LEU:CA 1:A:16:LEU:CB 1:A:16:LEU:CG 17 148.74 (1,521) 1:A:110:GLU:N 1:A:110:GLU:CA 1:A:110:GLU:CB 1:A:110:GLU:CG 1 148.75 (1,648) 1:A:13:GLU:N 1:A:15:VAL:CA 1:A:15:VAL:CB 1:A:15:VAL:CG 10 148.76 (1,655) 1:A:15:VAL:N 1:A:15:VAL:CA 1:A:15:VAL:CB 1:A:15:VAL:CG 10 148.66 (1,655) 1:A:15:VAL:N 1:A:	· · /						
1.613	/						
1.259	/						
(1,236) 1:A:17:VAL:N 1:A:17:VAL:CA 1:A:17:VAL:CB 1:A:17:VAL:CGI 9 148.86 (1,404) 1:A:70:GLU:N 1:A:10:GLU:CA 1:A:17:VAL:CB 1:A:17:VAL:CGI 1 148.85 (1,224) 1:A:13:GLU:N 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:CB 1:A:13:GU:CG 11 148.84 (1,662) 1:A:14:MET:N 1:A:15:MET:CA 1:A:15:MET:CB 1:A:13:GU:CG 18 148.83 (1,505) 1:A:106:TYR:N 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:CB 1:A:108:GLU:CG 7 148.83 (1,513) 1:A:108:GLU:N 1:A:108:GLU:CA 1:A:108:GLU:CB 1:A:108:GLU:CG 15 148.8 (1,523) 1:A:116:LEU:N 1:A:116:LEU:CA 1:A:153:LEU:CB 1:A:116:LEU:CG 8 148.76 (1,522) 1:A:116:LEU:N 1:A:13:GLU:CB 1:A:110:GLU:CB 1:A:110:GLU:CB 1:A:110:GLU:CB 1:A:110:GLU:CB 1:A:110:GLU:CB 1:A:116:LEU:CG 9 148.76 (1,522) 1:A:116:LEU:N 1:A:16:LEU:CB 1:A:110:GLU:CB 1:A:110:GLU:CB 1:A:110:GLU:CB 1:A:116:LEU:CB<	/						
(1,404) 1:A:70:GLU:N 1:A:70:GLU:CA 1:A:70:GLU:CB 1:A:70:GLU:CG 11 148.85 (1,224) 1:A:13:GLU:N 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:CB 1:A:13:GLU:CG 11 148.84 (1,662) 1:A:13:GLU:N 1:A:154:MET:N 1:A:154:MET:CA 1:A:14:MET:CCB 1:A:154:MET:CG 18 148.83 (1,505) 1:A:16:DETYR:N 1:A:16:METTR:CA 1:A:16:METTR:CB 1:A:16:METTR:CG 7 148.83 (1,513) 1:A:16:GETYR:N 1:A:108:GLU:CA 1:A:108:GLU:CB 1:A:106:TYR:CG 7 148.83 (1,513) 1:A:16:LEU:N 1:A:116:LEU:CA 1:A:116:LEU:CB 1:A:116:LEU:CG 8 148.78 (1,522) 1:A:110:GLU:CA 1:A:110:GLU:CB 1:A:110:GLU:CG 1:A:110:GLU:CG 20 148.76 (1,522) 1:A:116:LEU:N 1:A:116:LEU:CB 1:A:116:LEU:CG 9 148.76 (1,522) 1:A:116:LEU:N 1:A:116:LEU:CA 1:A:116:LEU:CB 1:A:116:LEU:CG 9 148.75 (1,428) 1:A:78:GU:N 1:A:34:16:LEU:CA 1:A:18:6LU	/						
(1,224) 1:A:13:GLU:N 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:CB 1:A:13:GLU:CG 11 148.84 (1,662) 1:A:154:MET:N 1:A:154:MET:CA 1:A:154:MET:CB 1:A:154:MET:CG 18 148.83 (1,505) 1:A:106:TYR:N 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:CB 1:A:108:GLU:CG 7 148.83 (1,513) 1:A:108:GLU:N 1:A:108:GLU:CA 1:A:108:GLU:CB 1:A:108:GLU:CG 15 148.8 (1,533) 1:A:116:LEU:N 1:A:116:LEU:CA 1:A:116:LEU:CB 1:A:116:LEU:CG 8 148.78 (1,657) 1:A:133:LEU:N 1:A:153:LEU:CA 1:A:133:LEU:CB 1:A:110:GLU:CG 20 148.76 (1,522) 1:A:110:GLU:CA 1:A:110:GLU:CG 1:A:110:GLU:CG 3 148.76 (1,524) 1:A:23:ARG:N 1:A:23:ARG:CA 1:A:23:ARG:CB 1:A:23:ARG:CG 14 148.76 (1,524) 1:A:16:LEU:N 1:A:16:LEU:CA 1:A:16:LEU:CB 1:A:110:GLU:CG 9 148.75 (1,428) 1:A:16:S:GLU:N 1:A:14:16:LEU:CA 1:A:141:GLU:CB 1:A:141:GLU:	(' /						
(1,662) 1:A:154:MET:N 1:A:154:MET:CA 1:A:154:MET:CB 1:A:154:MET:CG 18 148.83 (1,505) 1:A:106:TYR:N 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:CB 1:A:106:TYR:CG 7 148.83 (1,505) 1:A:108:GLU:N 1:A:108:GLU:CA 1:A:108:GLU:CB 1:A:108:GLU:CG 15 148.8 (1,533) 1:A:116:LEU:N 1:A:116:LEU:CA 1:A:116:LEU:CB 1:A:116:LEU:CG 8 148.78 (1,657) 1:A:153:LEU:N 1:A:153:LEU:CA 1:A:116:LEU:CB 1:A:116:LEU:CG 20 148.76 (1,522) 1:A:110:GLU:CA 1:A:110:GLU:CB 1:A:110:GLU:CD 3 148.76 (1,522) 1:A:116:LEU:N 1:A:23:ARG:CA 1:A:23:ARG:CB 1:A:116:LEU:CD 3 148.76 (1,521) 1:A:116:LEU:N 1:A:116:LEU:CA 1:A:116:LEU:CB 1:A:116:LEU:CG 9 148.75 (1,428) 1:A:141:GLU:N 1:A:141:GLU:CA 1:A:141:GLU:CB 1:A:141:GLU:CG 3 148.75 (1,521) 1:A:110:GLU:N 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:CB 1:A:141:GL	/						
(1,505) 1:A:106:TYR:N 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:CB 1:A:106:TYR:CG 7 148.83 (1,513) 1:A:108:GLU:N 1:A:108:GLU:CA 1:A:108:GLU:CB 1:A:108:GLU:CG 15 148.8 (1,513) 1:A:106:LEU:N 1:A:106:LEU:CA 1:A:116:LEU:CB 1:A:116:LEU:CG 8 148.78 (1,657) 1:A:153:LEU:N 1:A:153:LEU:CA 1:A:153:LEU:CB 1:A:153:LEU:CG 20 148.76 (1,522) 1:A:110:GLU:CA 1:A:110:GLU:CB 1:A:110:GLU:CD 3 148.76 (1,524) 1:A:23:ARG:N 1:A:23:ARG:CA 1:A:23:ARG:CB 1:A:116:LEU:CD 3 148.76 (1,524) 1:A:116:LEU:N 1:A:116:LEU:CA 1:A:116:LEU:CB 1:A:116:LEU:CG 9 148.75 (1,428) 1:A:16:LEU:N 1:A:141:GLU:CA 1:A:141:GLU:CB 1:A:141:GLU:CG 3 148.75 (1,614) 1:A:141:GLU:N 1:A:110:GLU:CA 1:A:110:GLU:CB 1:A:141:GLU:CG 17 148.74 (1,521) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VA	/						
(1,513) 1:A:108:GLU:N 1:A:108:GLU:CA 1:A:108:GLU:CB 1:A:108:GLU:CG 15 148.8 (1,533) 1:A:116:LEU:N 1:A:116:LEU:CA 1:A:116:LEU:CB 1:A:116:LEU:CG 8 148.78 (1,657) 1:A:153:LEU:N 1:A:153:LEU:CA 1:A:153:LEU:CB 1:A:116:LEU:CG 20 148.76 (1,522) 1:A:110:GLU:CA 1:A:110:GLU:CB 1:A:110:GLU:CD 3 148.76 (1,254) 1:A:23:ARG:N 1:A:23:ARG:CA 1:A:23:ARG:CB 1:A:13:GLU:CD 3 148.76 (1,532) 1:A:116:LEU:N 1:A:116:LEU:CA 1:A:116:LEU:CB 1:A:116:LEU:CG 9 148.75 (1,428) 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:16:LEU:CB 1:A:141:GLU:CG 3 148.75 (1,614) 1:A:141:GLU:N 1:A:141:GLU:CA 1:A:110:GLU:CB 1:A:141:GLU:CG 17 148.74 (1,521) 1:A:13:GLU:N 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:CB 1:A:13:GLU:CG 10 148.73 (1,224) 1:A:13:GLU:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:141:GLU:CG <td>· · /</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>	· · /						
(1,533) 1:A:116:LEU:N 1:A:116:LEU:CA 1:A:116:LEU:CB 1:A:116:LEU:CG 8 148.78 (1,657) 1:A:153:LEU:N 1:A:153:LEU:CA 1:A:153:LEU:CB 1:A:153:LEU:CG 20 148.76 (1,522) 1:A:110:GLU:CA 1:A:110:GLU:CB 1:A:110:GLU:CD 3 148.76 (1,254) 1:A:23:ARG:N 1:A:23:ARG:CA 1:A:23:ARG:CB 1:A:23:ARG:CG 14 148.76 (1,532) 1:A:116:LEU:N 1:A:116:LEU:CA 1:A:116:LEU:CB 1:A:116:LEU:CG 9 148.75 (1,428) 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:CB 1:A:78:GLU:CG 3 148.75 (1,614) 1:A:141:GLU:N 1:A:141:GLU:CA 1:A:141:GLU:CB 1:A:141:GLU:CG 17 148.74 (1,521) 1:A:110:GLU:N 1:A:110:GLU:CA 1:A:110:GLU:CB 1:A:110:GLU:CG 10 148.73 (1,224) 1:A:13:GLU:N 1:A:13:GLU:CA 1:A:15:VAL:CB 1:A:15:VAL:CG 12 148.68 (1,655) 1:A:14:1A:1A:1A:1A:1A:1A:1A:1A:1A:1A:1A:1A:1A:	/						
(1,657) 1:A:153:LEU:N 1:A:153:LEU:CA 1:A:153:LEU:CB 1:A:153:LEU:CG 20 148.76 (1,522) 1:A:110:GLU:CA 1:A:110:GLU:CB 1:A:110:GLU:CG 1:A:110:GLU:CD 3 148.76 (1,254) 1:A:23:ARG:N 1:A:23:ARG:CA 1:A:23:ARG:CB 1:A:23:ARG:CG 14 148.76 (1,532) 1:A:116:LEU:N 1:A:16:LEU:CA 1:A:116:LEU:CB 1:A:116:LEU:CG 9 148.75 (1,428) 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:CB 1:A:78:GLU:CG 3 148.75 (1,614) 1:A:141:GLU:N 1:A:141:GLU:CA 1:A:141:GLU:CB 1:A:141:GLU:CG 17 148.74 (1,521) 1:A:110:GLU:N 1:A:13:GLU:CA 1:A:110:GLU:CB 1:A:141:GLU:CG 10 148.73 (1,224) 1:A:13:GLU:N 1:A:15:VAL:CA 1:A:15:VAL:CB 1:A:15:VAL:CG 3 148.72 (1,655) 1:A:15:VAL:N 1:A:15:VAL:CA 1:A:15:VAL:CB 1:A:15:VAL:CG1 19 148.68 (1,655) 1:A:15:VAL:N 1:A:15:VAL:CA 1:A:15:VAL:CB	\ ' /						
(1,254) 1:A:23:ARG:N 1:A:23:ARG:CA 1:A:23:ARG:CB 1:A:23:ARG:CG 14 148.76 (1,532) 1:A:116:LEU:N 1:A:116:LEU:CA 1:A:116:LEU:CB 1:A:116:LEU:CG 9 148.75 (1,428) 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:CB 1:A:78:GLU:CG 3 148.75 (1,614) 1:A:141:GLU:N 1:A:141:GLU:CA 1:A:141:GLU:CB 1:A:141:GLU:CG 17 148.74 (1,521) 1:A:110:GLU:N 1:A:110:GLU:CA 1:A:110:GLU:CB 1:A:13:GLU:CG 10 148.73 (1,224) 1:A:13:GLU:N 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:CB 1:A:13:GLU:CG 3 148.72 (1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 12 148.68 (1,648) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 16 148.66 (1,265) 1:A:14:14:ASP:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 18 148.66 (1,265) 1:A:14:ASP:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:	(, ,					20	
(1,532) 1:A:116:LEU:N 1:A:116:LEU:CA 1:A:116:LEU:CB 1:A:116:LEU:CG 9 148.75 (1,428) 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:CB 1:A:78:GLU:CG 3 148.75 (1,614) 1:A:141:GLU:N 1:A:141:GLU:CA 1:A:141:GLU:CB 1:A:141:GLU:CG 17 148.74 (1,521) 1:A:110:GLU:N 1:A:110:GLU:CA 1:A:110:GLU:CB 1:A:110:GLU:CG 10 148.73 (1,224) 1:A:13:GLU:N 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:CB 1:A:13:GLU:CG 3 148.72 (1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 12 148.68 (1,648) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 16 148.66 (1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 18 148.66 (1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 18 148.66 (1,265) 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CA 1:A:79:HE	(1,522)	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	1:A:110:GLU:CD	3	148.76
(1,428) 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:CB 1:A:78:GLU:CG 3 148.75 (1,614) 1:A:141:GLU:N 1:A:141:GLU:CA 1:A:141:GLU:CB 1:A:141:GLU:CG 17 148.74 (1,521) 1:A:110:GLU:N 1:A:110:GLU:CA 1:A:110:GLU:CB 1:A:110:GLU:CG 10 148.73 (1,224) 1:A:13:GLU:N 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:CB 1:A:13:GLU:CG 3 148.72 (1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 12 148.68 (1,648) 1:A:149:THR:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:149:THR:OG1 19 148.68 (1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:149:THR:OG1 19 148.68 (1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 16 148.66 (1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 18 148.66 (1,265) 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CA 1:A:28:	(1,254)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	14	148.76
(1,614) 1:A:141:GLU:N 1:A:141:GLU:CA 1:A:141:GLU:CB 1:A:141:GLU:CG 17 148.74 (1,521) 1:A:110:GLU:N 1:A:110:GLU:CA 1:A:110:GLU:CB 1:A:110:GLU:CG 10 148.73 (1,224) 1:A:13:GLU:N 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:CB 1:A:13:GLU:CG 3 148.72 (1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 12 148.68 (1,648) 1:A:149:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:CB 1:A:149:THR:OG1 19 148.68 (1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:149:THR:OG1 19 148.68 (1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:149:THR:OG1 19 148.68 (1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:149:THR:OG1 18 148.66 (1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 18 148.66 (1,265) 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CB 1	(1,532)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	9	148.75
(1,614) 1:A:141:GLU:N 1:A:141:GLU:CA 1:A:141:GLU:CB 1:A:141:GLU:CG 17 148.74 (1,521) 1:A:110:GLU:N 1:A:110:GLU:CA 1:A:110:GLU:CB 1:A:110:GLU:CG 10 148.73 (1,224) 1:A:13:GLU:N 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:CB 1:A:13:GLU:CG 3 148.72 (1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 12 148.68 (1,648) 1:A:149:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:CB 1:A:149:THR:OG1 19 148.68 (1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 16 148.66 (1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 18 148.66 (1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 18 148.66 (1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 18 148.66 (1,265) 1:A:28:MET:N 1:A:14:151:VAL:CA <	· · /	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	3	148.75
(1,224) 1:A:13:GLU:N 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:CB 1:A:13:GLU:CG 3 148.72 (1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 12 148.68 (1,648) 1:A:149:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:CB 1:A:149:THR:OG1 19 148.68 (1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 16 148.66 (1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 18 148.66 (1,265) 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:CB 1:A:28:MET:CG 10 148.66 (1,201) 1:A:7:PHE:N 1:A:7:PHE:CA 1:A:7:PHE:CB 1:A:7:PHE:CG 14 148.66 (1,530) 1:A:114:ASP:N 1:A:114:ASP:CA 1:A:114:ASP:CB 1:A:114:ASP:CG 6 148.64 (1,411) 1:A:72:GLU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 14 148.63 (1,648) 1:A:149:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:150:ARG:CB <td>(1,614)</td> <td>1:A:141:GLU:N</td> <td>1:A:141:GLU:CA</td> <td>1:A:141:GLU:CB</td> <td>1:A:141:GLU:CG</td> <td>17</td> <td>148.74</td>	(1,614)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	17	148.74
(1,224) 1:A:13:GLU:N 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:CB 1:A:13:GLU:CG 3 148.72 (1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 12 148.68 (1,648) 1:A:149:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:CB 1:A:149:THR:OG1 19 148.68 (1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 16 148.66 (1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 18 148.66 (1,265) 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:CB 1:A:28:MET:CG 10 148.66 (1,201) 1:A:7:PHE:N 1:A:7:PHE:CA 1:A:7:PHE:CB 1:A:7:PHE:CG 14 148.66 (1,530) 1:A:114:ASP:N 1:A:114:ASP:CA 1:A:114:ASP:CB 1:A:114:ASP:CG 6 148.64 (1,411) 1:A:72:GLU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 14 148.63 (1,648) 1:A:149:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:150:ARG:CB <td>(1,521)</td> <td>1:A:110:GLU:N</td> <td>1:A:110:GLU:CA</td> <td>1:A:110:GLU:CB</td> <td>1:A:110:GLU:CG</td> <td>10</td> <td>148.73</td>	(1,521)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	10	148.73
(1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 12 148.68 (1,648) 1:A:149:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:CB 1:A:149:THR:OG1 19 148.68 (1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 16 148.66 (1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 18 148.66 (1,265) 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:CB 1:A:28:MET:CG 10 148.66 (1,201) 1:A:7:PHE:N 1:A:7:PHE:CA 1:A:7:PHE:CB 1:A:7:PHE:CG 14 148.66 (1,530) 1:A:114:ASP:N 1:A:114:ASP:CA 1:A:114:ASP:CB 1:A:114:ASP:CG 6 148.64 (1,411) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 14 148.63 (1,648) 1:A:149:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:CB 1:A:149:THR:OG1 8 148.62 (1,650) 1:A:150:ARG:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:CB<		1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	3	148.72
(1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 16 148.66 (1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 18 148.66 (1,265) 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:CB 1:A:28:MET:CG 10 148.66 (1,201) 1:A:7:PHE:N 1:A:7:PHE:CA 1:A:7:PHE:CB 1:A:7:PHE:CG 14 148.66 (1,530) 1:A:114:ASP:N 1:A:114:ASP:CA 1:A:114:ASP:CB 1:A:114:ASP:CG 6 148.64 (1,411) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 5 148.64 (1,227) 1:A:14:LEU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 14 148.63 (1,648) 1:A:149:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:CB 1:A:149:THR:OG1 8 148.62 (1,650) 1:A:150:ARG:N 1:A:150:ARG:CA 1:A:150:ARG:CB 1:A:150:ARG:CG 9 148.59 (1,323) 1:A:44:GLN:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:44:GLN:CB		1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	12	148.68
(1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 18 148.66 (1,265) 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:CB 1:A:28:MET:CG 10 148.66 (1,201) 1:A:7:PHE:N 1:A:7:PHE:CA 1:A:7:PHE:CB 1:A:7:PHE:CG 14 148.66 (1,530) 1:A:114:ASP:N 1:A:114:ASP:CA 1:A:114:ASP:CB 1:A:114:ASP:CG 6 148.64 (1,411) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 5 148.64 (1,227) 1:A:14:LEU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 14 148.63 (1,648) 1:A:149:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:CB 1:A:149:THR:OG1 8 148.62 (1,650) 1:A:150:ARG:N 1:A:150:ARG:CA 1:A:150:ARG:CB 1:A:150:ARG:CG 9 148.59 (1,411) 1:A:72:GLU:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:44:GLN:CB 1:A:44:GLN:CG 7 148.52	(1,648)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	19	148.68
(1,655) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 18 148.66 (1,265) 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:CB 1:A:28:MET:CG 10 148.66 (1,201) 1:A:7:PHE:N 1:A:7:PHE:CA 1:A:7:PHE:CB 1:A:7:PHE:CG 14 148.66 (1,530) 1:A:114:ASP:N 1:A:114:ASP:CA 1:A:114:ASP:CB 1:A:114:ASP:CG 6 148.64 (1,411) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 5 148.64 (1,227) 1:A:14:LEU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 14 148.63 (1,648) 1:A:149:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:CB 1:A:149:THR:OG1 8 148.62 (1,650) 1:A:150:ARG:N 1:A:150:ARG:CA 1:A:150:ARG:CB 1:A:150:ARG:CG 9 148.59 (1,411) 1:A:72:GLU:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:44:GLN:CB 1:A:44:GLN:CG 7 148.52	· · /	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	16	148.66
(1,265) 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:CB 1:A:28:MET:CG 10 148.66 (1,201) 1:A:7:PHE:N 1:A:7:PHE:CA 1:A:7:PHE:CB 1:A:7:PHE:CG 14 148.66 (1,530) 1:A:114:ASP:N 1:A:114:ASP:CA 1:A:114:ASP:CB 1:A:114:ASP:CG 6 148.64 (1,411) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:CB 1:A:72:GLU:CG 5 148.64 (1,227) 1:A:14:LEU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 14 148.63 (1,648) 1:A:149:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:CB 1:A:149:THR:OG1 8 148.62 (1,650) 1:A:150:ARG:N 1:A:150:ARG:CA 1:A:150:ARG:CB 1:A:150:ARG:CG 9 148.59 (1,411) 1:A:72:GLU:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:44:GLN:CB 1:A:44:GLN:CG 7 148.52	(/ /				1:A:151:VAL:CG1		
(1,201) 1:A:7:PHE:N 1:A:7:PHE:CA 1:A:7:PHE:CB 1:A:7:PHE:CG 14 148.66 (1,530) 1:A:114:ASP:N 1:A:114:ASP:CA 1:A:114:ASP:CB 1:A:114:ASP:CG 6 148.64 (1,411) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:CB 1:A:72:GLU:CG 5 148.64 (1,227) 1:A:14:LEU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 14 148.63 (1,648) 1:A:149:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:CB 1:A:149:THR:OG1 8 148.62 (1,650) 1:A:150:ARG:N 1:A:150:ARG:CA 1:A:150:ARG:CB 1:A:150:ARG:CG 9 148.59 (1,411) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:44:GLN:CB 1:A:44:GLN:CG 7 148.52	(/ /		1:A:28:MET:CA				
(1,530) 1:A:114:ASP:N 1:A:114:ASP:CA 1:A:114:ASP:CB 1:A:114:ASP:CG 6 148.64 (1,411) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:CB 1:A:72:GLU:CG 5 148.64 (1,227) 1:A:14:LEU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 14 148.63 (1,648) 1:A:149:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:CB 1:A:149:THR:OG1 8 148.62 (1,650) 1:A:150:ARG:N 1:A:150:ARG:CA 1:A:150:ARG:CB 1:A:150:ARG:CG 9 148.59 (1,411) 1:A:72:GLU:N 1:A:42:GLN:CA 1:A:44:GLN:CB 1:A:44:GLN:CG 7 148.52	(' /			1:A:7:PHE:CB			
(1,411) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:CB 1:A:72:GLU:CG 5 148.64 (1,227) 1:A:14:LEU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 14 148.63 (1,648) 1:A:149:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:CB 1:A:149:THR:OG1 8 148.62 (1,650) 1:A:150:ARG:N 1:A:150:ARG:CA 1:A:150:ARG:CB 1:A:150:ARG:CG 9 148.59 (1,411) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:42:GLN:CB 1:A:44:GLN:CG 7 148.52 (1,323) 1:A:44:GLN:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:44:GLN:CB 1:A:44:GLN:CG 7 148.52							
(1,227) 1:A:14:LEU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 14 148.63 (1,648) 1:A:149:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:CB 1:A:149:THR:OG1 8 148.62 (1,650) 1:A:150:ARG:N 1:A:150:ARG:CA 1:A:150:ARG:CB 1:A:150:ARG:CG 9 148.59 (1,411) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:42:GLN:CB 1:A:44:GLN:CG 7 148.52 (1,323) 1:A:44:GLN:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:44:GLN:CB 1:A:44:GLN:CG 7 148.52							
(1,648) 1:A:149:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:CB 1:A:149:THR:OG1 8 148.62 (1,650) 1:A:150:ARG:N 1:A:150:ARG:CA 1:A:150:ARG:CB 1:A:150:ARG:CG 9 148.59 (1,411) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:CB 1:A:72:GLU:CG 3 148.58 (1,323) 1:A:44:GLN:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:44:GLN:CB 1:A:44:GLN:CG 7 148.52	· · /						
(1,650) 1:A:150:ARG:N 1:A:150:ARG:CA 1:A:150:ARG:CB 1:A:150:ARG:CG 9 148.59 (1,411) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:CB 1:A:72:GLU:CG 3 148.58 (1,323) 1:A:44:GLN:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:44:GLN:CB 1:A:44:GLN:CG 7 148.52	· · /						
(1,411) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:CB 1:A:72:GLU:CG 3 148.58 (1,323) 1:A:44:GLN:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:44:GLN:CB 1:A:44:GLN:CG 7 148.52	· · /						
(1,323) 1:A:44:GLN:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:44:GLN:CB 1:A:44:GLN:CG 7 148.52	· · /						
	` ' /		I .				
$_{i}$ (1,0±0) 1.11.1± θ .11110.W 1.11.1± θ .11110.OA 1.11.1± θ .11110.OD 1.11.1± θ .11110.OD 0 140.0	(1,648)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	6	148.5
(1,482) 1:A:96:LYS:N 1:A:96:LYS:CA 1:A:96:LYS:CB 1:A:96:LYS:CG 1 148.49	· · /						



Key	ed from previous pag Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$ Violation (\circ) $
						, ,
(1,411)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	13	148.49
(1,346)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	17	148.49
(1,211)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	19	148.46
(1,663)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	5	148.44
(1,324)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	13	148.35
(1,533)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	20	148.34
(1,521)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	16	148.32
(1,547)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	16	148.29
(1,412)	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	1:A:72:GLU:CD	9	148.29
(1,212)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	4	148.25
(1,368)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	15	148.23
(1,221)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	7	148.23
(1,166)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	9	148.17
(1,405)	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	1:A:70:GLU:CD	7	148.15
(1,650)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	19	148.12
(1,323)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	5	148.12
(1,514)	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	1:A:108:GLU:CD	15	148.11
(1,211)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	15	148.11
(1,655)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	8	148.1
(1,550)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	20	148.07
(1,646)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	4	148.06
(1,655)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	1	148.05
(1,550)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	4	147.99
(1,514)	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	1:A:108:GLU:CD	2	147.99
(1,274)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	9	147.96
(1,224)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	13	147.96
(1,655)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	9	147.95
(1,576)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	10	147.92
(1,370) $(1,371)$	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	7	147.91
(1,505)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	8	147.85
(1,599)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:CB	1:A:137:ASP:CG	13	147.84
(1,657)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	18	147.79
(1,530)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	10	147.79
(1,330) $(1,410)$	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	10	147.79
(1,410) $(1,175)$	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	11	147.79
(1,173) $(1,453)$	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	6	147.78
(' /	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	15	
(1,441)			1:A:82:GLU:CB 1:A:150:ARG:CB	1:A:82:GLU:CG 1:A:150:ARG:CG		147.77
(1,651)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA			3	147.74
(1,403)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	6	147.72
(1,487)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	5	147.71
(1,651)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	17	147.7
(1,586)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	10	147.69
(1,560)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	3	147.69
(1,386)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	15	147.69
(1,576)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	12	147.68
(1,265)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	7	147.67
(1,248)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	7	147.66
(1,550)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	5	147.65
(1,375)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	8	147.6
(1,547)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	7	147.59
(1,241)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	14	147.58



Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,552)	1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:CA	1:A:123:ASN:CB	1:A:123:ASN:CG	15	147.55
(1,550)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	3	147.55
(1,410)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	15	147.55
(1,411)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	1	147.54
(1,346)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	1	147.54
(1,428)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	16	147.53
(1,613)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	19	147.45
(1,403)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	18	147.45
(1,411)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	2	147.42
(1,530)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	16	147.38
(1,368)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	20	147.37
(1,586)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	9	147.35
(1,245)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	2	147.34
(1,323)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	9	147.31
(1,655)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	13	147.28
(1,254)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	18	147.27
(1,482)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	19	147.26
(1,442)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	3	147.26
(1,442)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	6	147.26
(1,547)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	3	147.23
(1,256)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	7	147.23
(1,635)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	6	147.22
(1,317)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	9	147.21
(1,521)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	5	147.2
(1,284)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	20	147.18
(1,552)	1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:CA	1:A:123:ASN:CB	1:A:123:ASN:CG	13	147.16
(1,375)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	20	147.16
(1,470)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	15	147.15
(1,530)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	9	147.14
(1,256)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	6	147.14
(1,530)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	14	147.11
(1,513)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	6	147.1
(1,194)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	6	147.1
(1,227)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	18	146.98
(1,404)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	15	146.96
(1,212)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	13	146.96
(1,655)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	4	146.95
(1,576)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	4	146.95
(1,294)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	5	146.92
(1,676)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	10	146.85
(1,221)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	17	146.83
(1,386)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	9	146.77
(1,346)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	6	146.75
(1,454)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	12	146.72
(1,662)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	4	146.69
(1,399)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	15	146.65
(1,634)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	8	146.62
(1,182)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	12	146.61
(1,533)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	19	146.59
(1,285)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	16	146.59
(1,487)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	12	146.53
(, - ·)		1	1 10103	1		ed on nert nage



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,347)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	2	146.53
(1,442)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	12	146.52
(1,324)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	16	146.51
(1,337)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	9	146.5
(1,216)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	7	146.48
(1,513)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	12	146.46
(1,411)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	6	146.46
(1,375)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	13	146.46
(1,429)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	19	146.45
(1,560)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	8	146.43
(1,560)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	20	146.43
(1,284)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	4	146.42
(1,182)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	17	146.42
(1,513)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	8	146.41
(1,212)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	20	146.37
(1,648)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	11	146.32
(1,337)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	1	146.31
(1,278)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	19	146.31
(1,648)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	10	146.29
(1,655)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	20	146.28
(1,386)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	14	146.27
(1,552)	1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:CA	1:A:123:ASN:CB	1:A:123:ASN:CG	6	146.26
(1,550)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	6	146.24
(1,487)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	8	146.22
(1,221)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	8	146.22
(1,227)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	3	146.21
(1,404)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	4	146.18
(1,296)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	17	146.17
(1,635)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	11	146.15
(1,428)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	7	146.15
(1,571)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	15	146.11
(1,634)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	9	146.1
(1,194)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	4	146.09
(1,227)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	5	146.06
(1,296)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	4	146.04
(1,212)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	14	146.02
(1,176)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	12	146.02
(1,521)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	11	145.99
(1,266)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	5	145.99
(1,641)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	9	145.98
(1,501) $(1,505)$	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	2	145.98
(1,300) $(1,428)$	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	9	145.98
(1,120) $(1,259)$	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	13	145.98
(1,593)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	10	145.95
(1,646)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	16	145.94
(1,399)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	12	145.94
(1,560)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	4	145.92
(1,300) $(1,323)$	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	6	145.9
(1,323) $(1,227)$	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	2	145.9
(1,586)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	4	145.89
(1,330) $(1,441)$	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	16	145.86
(1,441)	1.71.02.GLU.IN	1.11.02.GLU.UA	1.11.02.GLU.OD	1.11.02.GLU.UG		ed on nert nage



Key	$egin{array}{c} ed \ from \ previous \ pag \ \hline oldsymbol{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,411)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	9	145.82
(1,332)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	13	145.82
(1,287)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	4	145.81
(1,593)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	18	145.78
(1,635)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	7	145.77
(1,243)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	17	145.74
(1,375)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	18	145.72
(1,411)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	17	145.71
(1,586)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	12	145.69
(1,513)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	10	145.69
(1,308)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	11	145.67
(1,259)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	2	145.66
(1,482)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	2	145.65
(1,655)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	11	145.62
(1,296)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	19	145.62
(1,613)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	2	145.6
(1,296)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	3	145.58
(1,201)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	18	145.58
(1,569)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	2	145.57
(1,403)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	8	145.56
(1,332)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	18	145.56
(1,648)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	5	145.55
(1,648)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	7	145.55
(1,375)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	9	145.5
(1,259)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	15	145.49
(1,183)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	15	145.49
(1,278)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	16	145.46
(1,183)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	7	145.46
(1,613)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	8	145.41
(1,513)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	11	145.38
(1,482)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	13	145.38
(1,284)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	9	145.38
(1,259)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	8	145.38
(1,403)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	14	145.37
(1,256)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	13	145.35
(1,346)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	20	145.31
(1,332)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	3	145.31
(1,636)	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	1:A:146:GLN:CD	16	145.3
(1,308)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	15	145.21
(1,532)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	13	145.18
(1,521)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	15	145.17
(1,490)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	12	145.12
(1,324)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	17	145.1
(1,547)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	19	144.99
(1,279)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	14	144.99
(1,526)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	14	144.97
(1,326) $(1,216)$	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	3	144.96
(1,541)	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	1:A:118:LYS:CD	2	144.94
(1,194)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	13	144.91
(1,676)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	6	144.89
(1,455)	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	1:A:86:ARG:CD	17	144.89
(+, +00)	1.1.1.00.111.01.011		1.11.00.111.00.00	1.1.1.0.111.0.01		ed on nert nage



	ed from previous pag		A		3.6.1.1	T 71 1 11 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,521)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	19	144.88
(1,530)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	5	144.84
(1,593)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1	144.82
(1,228)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	15	144.79
(1,411)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	19	144.78
(1,221)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	18	144.77
(1,676)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	9	144.75
(1,292)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	4	144.75
(1,483)	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	1:A:96:LYS:CD	3	144.74
(1,286)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	16	144.73
(1,642)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	15	144.71
(1,292)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	11	144.71
(1,648)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	18	144.7
(1,336)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	14	144.69
(1,663)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	10	144.64
(1,505)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	5	144.64
(1,222)	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	1:A:12:LYS:CD	19	144.63
(1,292)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	15	144.62
(1,586)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	13	144.58
(1,646)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	5	144.54
(1,647)	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	1:A:148:ARG:CD	12	144.53
(1,292)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	16	144.43
(1,256)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	10	144.43
(1,561)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	15	144.42
(1,386)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	18	144.41
(1,255)	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	1:A:23:ARG:CD	1	144.41
(1,647)	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	1:A:148:ARG:CD	10	144.4
(1,486)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	13	144.39
(1,403)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	7	144.37
(1,336)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	15	144.37
(1,373)	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	1:A:60:ARG:CD	5	144.36
(1,547)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	1	144.33
(1,547)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	12	144.33
(1,682)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	19	144.29
(1,663)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	12	144.29
(1,562)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	2	144.28
(1,547)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	6	144.26
(1,399)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	18	144.25
(1,375)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	3	144.25
(1,248)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	6	144.24
(1,482)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	18	144.23
(1,471)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	7	144.2
(1,539)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	15	144.18
(1,513)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	13	144.13
(1,229)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	17	144.13
(1,453)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	14	144.08
(1,368)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	7	144.07
(1,228)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	18	144.05
(1,652)	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	1:A:150:ARG:CD	20	144.04
(1,346)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	13	144.04
(1,340) $(1,399)$	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	4	144.03
(1,000)	1.71.05.1 111.11	1.71.00.1 11D.OA	1.71.00.1 HE.OD	1.11.00.11111.00		od on next nage



Key	$egin{array}{c} ext{ed from previous pag} \ ext{ } ext{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,599)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:CB	1:A:137:ASP:CG	19	144.01
(1,454)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	10	143.98
(1,506)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	16	143.95
(1,645)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	19	143.94
(1,542)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	12	143.94
(1,652)	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	1:A:150:ARG:CD	7	143.91
(1,386)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	3	143.91
(1,378)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	6	143.91
(1,211)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	16	143.91
(1,300)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	7	143.89
(1,659)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	4	143.86
(1,550)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	1	143.84
(1,255)	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	1:A:23:ARG:CD	9	143.84
(1,373)	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	1:A:60:ARG:CD	19	143.83
(1,521)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	1	143.82
(1,332)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	4	143.8
(1,368)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	11	143.79
(1,561)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	12	143.78
(1,201)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	13	143.75
(1,488)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	3	143.74
(1,274)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	17	143.74
(1,560)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	9	143.7
(1,300) $(1,300)$	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	9	143.69
(1,561)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	6	143.65
(1,241)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	16	143.64
(1,534)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	3	143.63
(1,254)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	12	143.63
(1,652)	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	1:A:150:ARG:CD	6	143.62
(1,530)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	13	143.62
(1,294)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	7	143.6
(1,455)	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	1:A:86:ARG:CD	12	143.57
(1,453)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	7	143.57
(1,368)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	6	143.54
(1,266)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	11	143.54
(1,354)	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	1:A:51:LYS:CD	8	143.52
(1,255)	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	1:A:23:ARG:CD	3	143.49
(1,652)	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	1:A:150:ARG:CD	4	143.47
(1,430)	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	1:A:78:GLU:CD	3	143.46
(1,346)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	15	143.46
(1,183)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	1	143.45
(1,324)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	8	143.43
(1,194)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	14	143.43
(1,193)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	10	143.43
(1,655)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	3	143.42
(1,228)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	20	143.41
(1,278)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	20	143.4
(1,414)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	10	143.38
(1,373)	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	1:A:60:ARG:CD	10	143.37
(1,652)	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	1:A:150:ARG:CD	8	143.36
(1,536)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	16	143.35
(1,300) $(1,201)$	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	19	143.35
(1,201)	1.72.1.1 1117.11	1	1	1.11.1.1 1111.00		ed on nert nage



Key	ed from previous pag Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,368)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	16	143.32
(1,568)	1:A:30:FHE:N 1:A:130:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	11	143.3
(1,500) $(1,542)$	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	17	143.3
(1,542) $(1,571)$	1:A:119:TKF:N 1:A:132:TYR:N	1:A:119:1 KF:CA 1:A:132:TYR:CA	1:A:119:TKF:CB 1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	20	143.29
(1,371) $(1,375)$	1:A:61:TYR:N	1:A:132:11R:CA 1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	10	143.29
(1,373) $(1,286)$	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	15	143.28
(1,280) $(1,482)$	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	14	143.25
(1,462) $(1,455)$	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	1:A:90:L15:CG 1:A:86:ARG:CD	11	143.25
(1,386)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	19	143.25
(1,568)	1:A:130:GLU:N	1:A:04:ME1:CA 1:A:130:GLU:CA	1:A:04:ME1:CB 1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	5	143.21
· · /	1:A:130:GLU:N 1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA 1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB 1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG 1:A:130:GLU:CG	13	143.18
(1,568)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA 1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	13	143.18
(1,513)	1:A:108:GLU:N 1:A:121:ASP:N	1:A:108:GLU:CA 1:A:121:ASP:CA	1:A:108:GLU:CB 1:A:121:ASP:CB	1:A:108:GLU:CG 1:A:121:ASP:CG	8	143.17
(1,547)	1:A:121:A5F:N 1:A:133:GLU:N			1:A:133:GLU:CG		
(1,576)	1:A:133:GLU:N 1:A:119:TRP:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB		18	143.16
(1,542)		1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	9	143.14
(1,614)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	4	143.13
(1,194)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	5	143.13
(1,535)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	9	143.12
(1,292)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	19	143.12
(1,248)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	14	143.11
(1,657)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	8	143.1
(1,547)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	9	143.08
(1,542)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	3	143.08
(1,194)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	2	143.08
(1,274)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	7	143.05
(1,212)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	11	143.05
(1,175)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	20	143.04
(1,655)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	15	143.03
(1,319)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	18	143.02
(1,280)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	9	143.02
(1,275)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	10	142.99
(1,646)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	6	142.98
(1,166)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	11	142.98
(1,655)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	7	142.95
(1,319)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	10	142.95
(1,255)	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	1:A:23:ARG:CD	4	142.94
(1,255)	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	1:A:23:ARG:CD	11	142.94
(1,354)	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	1:A:51:LYS:CD	15	142.93
(1,347)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	3	142.93
(1,488)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	4	142.87
(1,308)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	2	142.87
(1,555)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	7	142.85
(1,403)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	13	142.85
(1,284)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	5	142.85
(1,669)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	14	142.83
(1,274)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	4	142.81
(1,189)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	1	142.79
(1,189)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	6	142.78
(1,330)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1	142.77
(1,560)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	18	142.74
(1,670)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	12	142.73



Key	$egin{array}{c} ext{ed from previous pag} \ ext{ } ext{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,520)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	13	142.73
(1,411)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	8	142.73
(1,368)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	18	142.73
(1,255)	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	1:A:23:ARG:CD	10	142.67
(1,194)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	20	142.67
(1,614)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	10	142.66
(1,642)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	3	142.65
(1,455)	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	1:A:86:ARG:CD	9	142.63
(1,332)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	10	142.62
(1,222)	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	1:A:12:LYS:CD	9	142.62
(1,336)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	17	142.59
(1,561)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	4	142.58
(1,295)	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	1:A:36:GLU:CD	15	142.57
(1,542)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	7	142.55
(1,536)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	9	142.53
(1,266)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	6	142.53
(1,265)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	15	142.53
(1,533)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	18	142.52
(1,332)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	9	142.52
(1,332) $(1,279)$	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	6	142.46
(1,183)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	4	142.45
(1,189)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	9	142.44
(1,576)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	5	142.43
(1,593)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	17	142.42
(1,526)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	15	142.4
(1,189)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	5	142.4
(1,175)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	10	142.4
(1,189)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	4	142.39
(1,386)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	8	142.38
(1,373)	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	1:A:60:ARG:CD	18	142.38
(1,366)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	20	142.38
(1,648)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	4	142.37
(1,527)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	18	142.37
(1,321) $(1,243)$	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	19	142.35
(1,526)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	13	142.34
(1,194)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	19	142.3
(1,652)	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	1:A:150:ARG:CD	18	142.29
(1,032) $(1,219)$	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	14	142.29
(1,347)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	19	142.27
(1,319)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	8	142.26
(1,635)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	17	142.25
(1,536)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	1	142.25
(1,530) $(1,530)$	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	19	142.25
(1,397)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	8	142.24
(1,397) $(1,275)$	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	3	142.23
(1,275) $(1,225)$	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	1:A:13:GLU:CD	14	142.23
(1,223) $(1,542)$	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	5	142.23
(1,642) $(1,659)$	1:A:119:1 RF:N 1:A:153:LEU:CA	1:A:119:1 KF:CA 1:A:153:LEU:CB	1:A:119:1 RF:CB 1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	7	142.2
(1,039) $(1,189)$	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	2	142.15
(1,189) $(1,482)$	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA 1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	8	142.13
(1,482) $(1,319)$	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:90:L15:CG 1:A:43:LEU:CD1	13	142.14
(1,019)	1.A.43.LEU.UA	1.A.43.LEU.OD	1.A.45.LEU.UG	1.A.45.LEU.CDI		ed on nert nage



Key	$egin{array}{c} ext{ed from previous pag} \ ext{ } ext{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,520)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	6	142.12
(1,228)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	6	142.12
(1,483)	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	1:A:96:LYS:CD	11	142.11
(1,531)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	1	142.09
(1,527)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	6	142.09
(1,670)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	1	142.08
(1,318)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	15	142.08
(1,560)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	19	142.06
(1,292)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	6	142.06
(1,284)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	7	142.06
(1,255)	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	1:A:23:ARG:CD	5	142.04
(1,278)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	20	142.03
(1,634)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	20	141.99
(1,455)	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	1:A:86:ARG:CD	6	141.96
(1,378)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	15	141.95
(1,221)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	20	141.94
(1,552)	1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:CA	1:A:123:ASN:CB	1:A:123:ASN:CG	7	141.93
(1,536)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	15	141.92
(1,354)	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	1:A:51:LYS:CD	19	141.89
(1,547)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	17	141.88
(1,642)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	10	141.87
(1,541)	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	1:A:118:LYS:CD	19	141.85
(1,397)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	3	141.83
(1,201)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	2	141.8
(1,547)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	2	141.79
(1,317)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	20	141.79
(1,542)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	4	141.78
(1,319)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	16	141.78
(1,346)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	14	141.76
(1,681)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	8	141.75
(1,636)	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	1:A:146:GLN:CD	10	141.73
(1,536)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	17	141.73
(1,222)	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	1:A:12:LYS:CD	1	141.72
(1,490)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	1	141.71
(1,201)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	6	141.71
(1,676)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	15	141.68
(1,659)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	15	141.67
(1,183)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	11	141.67
(1,318)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	2	141.66
(1,663)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	14	141.65
(1,324)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	12	141.64
(1,568)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	19	141.63
(1,375)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	7	141.61
(1,400)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	8	141.59
(1,652)	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	1:A:150:ARG:CD	3	141.57
(1,635)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	14	141.55
(1,520)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	9	141.54
(1,472)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	11	141.54
(1,337)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	13	141.54
(1,287)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	20	141.54
(1,176)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	7	141.54



Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,648)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	14	141.53
(1,208)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	20	141.49
(1,347)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	18	141.47
(1,296)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	9	141.45
(1,534)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	6	141.41
(1,513)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	19	141.41
(1,683)	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	1:A:157:GLU:CD	5	141.4
(1,454)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	16	141.38
(1,292)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	20	141.37
(1,242)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	16	141.37
(1,642)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	18	141.36
(1,541)	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	1:A:118:LYS:CD	11	141.36
(1,537)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	18	141.36
(1,488)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	16	141.36
(1,641)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	7	141.34
(1,166)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	16	141.34
(1,259)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	3	141.33
(1,642)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	9	141.32
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	6	141.32
(1,222)	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	1:A:12:LYS:CD	8	141.3
(1,176)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	1	141.29
(1,635)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	12	141.28
(1,576)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	8	141.28
(1,513)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	4	141.28
(1,228)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	7	141.27
(1,533)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	15	141.26
(1,222)	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	1:A:12:LYS:CD	15	141.23
(1,194)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	17	141.22
(1,266)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	16	141.21
(1,536)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	19	141.17
(1,386)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	1	141.17
(1,655)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	2	141.15
(1,403)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	3	141.14
(1,663)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	7	141.13
(1,655)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	14	141.11
(1,166)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	8	141.11
(1,482)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	20	141.09
(1,354)	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	1:A:51:LYS:CD	14	141.09
(1,539)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	2	141.06
(1,166)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	10	141.05
(1,255)	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	1:A:23:ARG:CD	8	141.03
(1,635)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	13	141.02
(1,227)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	10	140.99
(1,670)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	6	140.98
(1,254)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	6	140.98
(1,256)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	2	140.96
(1,512)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	2	140.95
(1,635)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	10	140.94
(1,488)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	15	140.93
(1,652)	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	1:A:150:ARG:CD	9	140.92
(1,319)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	5	140.9
(1,010)	1.1.1.10.111	1.11.10.22.00	1.11.10.22.00	1.11.13.1212.01011		ed on nert nage



Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,281)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	16	140.88
(1,560)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	16	140.87
(1,663)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	3	140.84
(1,289)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	5	140.83
(1,655)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	10	140.81
(1,281)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	5	140.81
(1,471)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	15	140.8
(1,227)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	9	140.8
(1,658)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	10	140.79
(1,373)	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	1:A:60:ARG:CD	7	140.77
(1,614)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	12	140.76
(1,397)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	18	140.76
(1,289)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	11	140.76
(1,576)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	20	140.75
(1,455)	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	1:A:86:ARG:CD	20	140.75
(1,647)	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	1:A:148:ARG:CD	11	140.73
(1,490)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	5	140.72
(1,211)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	5	140.71
(1,318)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	14	140.7
(1,216)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	13	140.7
(1,379)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	18	140.68
(1,647)	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	1:A:148:ARG:CD	16	140.66
(1,520)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	17	140.65
(1,490)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	6	140.65
(1,470)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	20	140.65
(1,539)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	18	140.63
(1,189)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	8	140.6
(1,489)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	19	140.59
(1,297)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	1	140.57
(1,676)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	19	140.55
(1,560)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	14	140.51
(1,294)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	13	140.5
(1,442)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	19	140.49
(1,547)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	15	140.43
(1,318)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	9	140.42
(1,319)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	7	140.4
(1,560)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	10	140.36
(1,375)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	12	140.36
(1,596)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	16	140.35
(1,346)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	12	140.34
(1,569)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	20	140.32
(1,642)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	16	140.29
(1,281)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	3	140.25
(1,189)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	18	140.25
(1,586)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	5	140.24
(1,471)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	5	140.24
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	1	140.24
(1,539)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	14	140.23
(1,242)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	2	140.21
(1,663)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	1	140.2
(1,534)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	20	140.2



Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,188)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	15	140.2
(1,278)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	10	140.18
(1,182)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	2	140.18
(1,547)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	5	140.17
(1,536)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	5	140.16
(1,216)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	9	140.16
(1,490)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	19	140.13
(1,332)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	11	140.1
(1,261)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	12	140.08
(1,682)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	4	140.07
(1,682)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	20	140.06
(1,332)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	16	140.05
(1,274)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	6	140.0
(1,441)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	11	139.98
(1,330)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	15	139.98
(1,212)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	10	139.98
(1,642)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	6	139.97
(1,455)	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	1:A:86:ARG:CD	1	139.96
(1,547)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	10	139.95
(1,670)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	16	139.94
(1,249)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	15	139.94
(1,296)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	6	139.93
(1,242)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	14	139.93
(1,227)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	16	139.93
(1,375)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	6	139.91
(1,249)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	13	139.88
(1,614)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	13	139.87
(1,300)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	11	139.87
(1,586)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	14	139.86
(1,222)	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	1:A:12:LYS:CD	16	139.86
(1,659)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	16	139.85
(1,319)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	4	139.85
(1,287)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	9	139.84
(1,489)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	7	139.82
(1,536)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	13	139.8
(1,399)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	11	139.76
(1,294)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	10	139.74
(1,208)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	12	139.74
(1,208)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	11	139.71
(1,614)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	7	139.64
(1,594)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	19	139.62
(1,454)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	15	139.62
(1,336)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	11	139.62
(1,227)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	12	139.59
(1,470)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	16	139.56
(1,266)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	17	139.55
(1,536)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	8	139.54
(1,310)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	6	139.54
(1,201)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	1	139.52
(1,541)	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	1:A:118:LYS:CD	20	139.51
(1,208)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	6	139.48



	ed from previous pag	e Atom-2	Atom 2	Atom 4	Model	Violetien (a)
Key	Atom-1		Atom-3	Atom-4		Violation (°)
(1,249)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	4	139.46
(1,682)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	2	139.44
(1,208)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	17	139.44
(1,646)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	17	139.43
(1,166)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	7	139.39
(1,651)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	4	139.38
(1,579)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	12	139.35
(1,300)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	20	139.33
(1,289)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	15	139.33
(1,189)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	11	139.32
(1,533)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	14	139.3
(1,646)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	13	139.27
(1,317)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	11	139.25
(1,310)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	10	139.25
(1,309)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	7	139.25
(1,346)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	9	139.23
(1,646)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	20	139.21
(1,318)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	1	139.19
(1,534)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	15	139.14
(1,255)	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	1:A:23:ARG:CD	7	139.13
(1,397)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	2	139.11
(1,278)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	12	139.1
(1,659)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	6	139.05
(1,513)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	18	139.04
(1,375)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	11	139.04
(1,189)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	7	139.01
(1,472)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	1	139.0
(1,525)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	3	138.98
(1,647)	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	1:A:148:ARG:CD	19	138.97
(1,494)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	13	138.97
(1,614)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	18	138.96
(1,663)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	16	138.95
(1,266)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	12	138.94
(1,472)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	4	138.93
(1,586)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	6	138.92
(1,534)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	8	138.91
(1,399)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	6	138.91
(1,216)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	18	138.91
(1,527)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	3	138.89
(1,571)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	3	138.87
(1,547)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	14	138.87
(1,542)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	10	138.87
(1,332)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	8	138.85
(1,560)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	12	138.84
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	7	138.8
(1,642)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	8	138.79
(1,539)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	16	138.78
(1,246)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	15	138.76
(1,579)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	7	138.74
(1,541)	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	1:A:118:LYS:CD	18	138.74
(1,531) $(1,530)$	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	8	138.74
(+,000)	1.11.111.11101 .11			1.11.111.11.01.00		od on nort nage



Key	ed from previous pag Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,300)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	1	138.74
(1,194)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	7	138.73
(1,300)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	10	138.71
(1,383) $(1,287)$	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	1	138.71
(1,525)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	6	138.69
(1,208)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	9	138.68
(1,373)	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	1:A:60:ARG:CD	16	138.67
(1,319) $(1,189)$	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	12	138.67
(1,592)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	15	138.62
(1,525) $(1,525)$	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	5	138.59
(1,536)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	10	138.57
(1,930) $(1,278)$	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	18	138.56
(1,275) $(1,175)$	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	19	138.56
(1,175) $(1,175)$	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	8	138.55
(1,525)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	14	138.54
(1,323) (1,249)	1:A:22:ILE:N	1:A:112.VAL.CA 1:A:22:ILE:CA	1:A:112. VAL.CB	1:A:22:ILE:CG1	3	138.53
(1,249) $(1,579)$	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	18	138.49
(1,313) $(1,219)$	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	2	138.49
(1,213) $(1,201)$	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	9	138.48
(1,201) $(1,541)$	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	1:A:118:LYS:CD	14	138.46
(1,541) $(1,569)$	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	12	138.45
(1,309) $(1,189)$	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	10	138.45
(1,169) $(1,354)$	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	1:A:51:LYS:CD	12	138.41
(1,386)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	20	138.38
(1,380) $(1,227)$	1:A:14:LEU:N	1:A:04:ME1:CA 1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	19	138.38
	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	18	138.36
(1,310)	1:A:4:GLU:N	1:A:42:ILE:CA 1:A:4:GLU:CA	1:A:42:ILE:CB 1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	18	138.36
(1,183)	1:A:4:GLU:N 1:A:150:ARG:CA					
(1,652)		1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	1:A:150:ARG:CD	16 7	138.34
(1,200)	1:A:7:PHE:N 1:A:136:LEU:CA	1:A:7:PHE:CA 1:A:136:LEU:CB	1:A:7:PHE:CB 1:A:136:LEU:CG	1:A:7:PHE:CG 1:A:136:LEU:CD1		138.34 138.32
(1,595)	1:A:130:LEU:CA 1:A:148:ARG:N	1:A:130:LEU:CB 1:A:148:ARG:CA	1:A:130:LEU:CG 1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	15 3	138.28
(1,646)		1:A:148:ARG:CA 1:A:116:LEU:CB				
(1,534)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB 1:A:148:ARG:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	11 6	138.27
(1,647)	1:A:148:ARG:CA 1:A:117:MET:N	1:A:148:ARG:CB 1:A:117:MET:CA	1:A:148:ARG:CG 1:A:117:MET:CB	1:A:148:ARG:CD 1:A:117:MET:CG	20	138.22 138.21
(1,536)						138.21
(1,635)			1:A:146:GLN:CB 1:A:10:GLU:CB	1:A:146:GLN:CG	4	
(1,212)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA		1:A:10:GLU:CG	12	138.17
(1,201)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	3	138.17
(1,663)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	9	138.16
(1,663)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	6	138.15
(1,561)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	17	138.14
(1,397)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	14	138.14
(1,655)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	5	138.13
(1,294)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	1	138.13
(1,165)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	18	138.08
(1,354)	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	1:A:51:LYS:CD	10	138.05
(1,635)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	2	138.02
(1,613)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	20	138.02
(1,371)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	17	138.01
(1,397)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	6	137.99
(1,194)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	15	137.98
(1,255)	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	1:A:23:ARG:CD	13	137.95



	ed from previous pag			1	26 11	T70 1 .0 /)
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,542)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	13	137.9
(1,539)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	1	137.89
(1,525)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	8	137.89
(1,397)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	1	137.88
(1,490)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	4	137.87
(1,488)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	17	137.87
(1,415)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	19	137.87
(1,294)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	9	137.87
(1,208)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	19	137.87
(1,243)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	6	137.85
(1,521)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	2	137.84
(1,346)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	7	137.82
(1,542)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	6	137.81
(1,647)	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	1:A:148:ARG:CD	3	137.79
(1,404)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	10	137.79
(1,255)	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	1:A:23:ARG:CD	16	137.78
(1,648)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	20	137.75
(1,525)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	12	137.74
(1,470)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	13	137.71
(1,455)	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	1:A:86:ARG:CD	4	137.71
(1,569)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	3	137.7
(1,222)	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	1:A:12:LYS:CD	2	137.69
(1,520)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	20	137.67
(1,373)	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	1:A:60:ARG:CD	9	137.66
(1,300)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	17	137.66
(1,300)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	19	137.65
(1,576)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	17	137.64
(1,319)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	6	137.62
(1,547)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	20	137.59
(1,397)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	17	137.59
(1,670)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	2	137.58
(1,525)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	16	137.53
(1,222)	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	1:A:12:LYS:CD	12	137.52
(1,547)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	13	137.49
(1,525)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	17	137.49
(1,539)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	19	137.48
(1,539)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	8	137.45
(1,243)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	20	137.4
(1,403)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	9	137.38
(1,208)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	1	137.37
(1,651)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	12	137.36
(1,594)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	17	137.36
(1,228)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	1	137.33
(1,526)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	8	137.31
(1,397)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	7	137.31
(1,249)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	16	137.31
(1,682)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	5	137.27
(1,373)	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	1:A:60:ARG:CD	13	137.27
(1,386)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	5	137.24
(1,249)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	17	137.22
					1	- · · · -



Key	$egin{array}{c} ext{ed from previous pag} \ ext{ } ext{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,579)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	2	137.18
(1,455)	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	1:A:86:ARG:CD	5	137.18
(1,453)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	20	137.18
(1,199) $(1,219)$	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	12	137.18
(1,397)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	19	137.17
(1,294)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	2	137.16
(1,580)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	10	137.11
(1,442)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	7	137.1
(1,220)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	3	137.09
(1,249)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	10	137.08
(1,266)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	9	137.06
(1,293)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	17	137.05
(1,301)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	8	137.04
(1,354)	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	1:A:51:LYS:CD	17	137.0
(1,309)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	5	136.99
(1,304)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:CB	1:A:41:ASP:CG	16	136.98
(1,472)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	14	136.96
(1,373)	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	1:A:60:ARG:CD	6	136.95
(1,373) $(1,286)$	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	14	136.95
(1,255)	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	1:A:23:ARG:CD	18	136.94
(1,233) $(1,414)$	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	17	136.91
(1,414) $(1,534)$	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	12	136.9
(1,334) $(1,189)$	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	20	136.89
(1,169) $(1,641)$	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	17	136.85
(1,641) $(1,652)$	1:A:150:ARG:CA	1:A:147:LEU:CA 1:A:150:ARG:CB	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEO:CG 1:A:150:ARG:CD	5	136.84
(1,032) $(1,292)$	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	8	136.84
(, ,	1:A:30:GLU:N 1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	19	136.82
(1,534)	1:A:110:LEU:CA 1:A:125:PHE:N	1:A:110:LEU:CB 1:A:125:PHE:CA	1:A:110:LEU:CG 1:A:125:PHE:CB	1:A:110:LEU:CD1 1:A:125:PHE:CG	13	136.79
(1,555) $(1,489)$	1:A:125:FHE:N 1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:125:FHE:CG 1:A:101:LEU:CD1	6	136.78
(1,489) $(1,190)$	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	2	136.78
(1,190) $(1,521)$	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:0:GLU:CG	14	136.76
(1,321) $(1,293)$		1:A:110:GLU:CA 1:A:36:GLU:CA		1:A:36:GLU:CG		136.76
, ,	1:A:36:GLU:N		1:A:36:GLU:CB 1:A:60:ARG:CG	1:A:60:ARG:CD	12	
(1,373)	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB 1:A:135:TYR:CA			4	136.74
(1,586)	1:A:135:TYR:N		1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	1	136.72
(1,579)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	17	136.66
(1,229)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	19	136.63
(1,634)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	15	136.55
(1,505)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	3	136.51
(1,539)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	20	136.49
(1,525)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	9	136.49
(1,386)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	6	136.49
(1,386)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	17	136.48
(1,324)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	1	136.43
(1,274)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	8	136.4
(1,386)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	11	136.39
(1,648)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	9	136.38
(1,287)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	12	136.38
(1,670)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	9	136.36
(1,562)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	5	136.29
(1,284)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	11	136.28
(1,455)	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	1:A:86:ARG:CD	3	136.26



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,414)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	5	136.22
(1,289)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	10	136.21
(1,278)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	8	136.21
(1,669)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	17	136.2
(1,534)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	18	136.19
(1,373)	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	1:A:60:ARG:CD	1	136.18
(1,176)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	16	136.15
(1,300)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	16	136.14
(1,576)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	11	136.12
(1,586)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	11	136.11
(1,403)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	1	136.05
(1,429)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	5	135.99
(1,560)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	17	135.98
(1,378)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	7	135.93
(1,278)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1	135.92
(1,249)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	9	135.92
(1,527)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	1	135.91
(1,411)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	16	135.86
(1,289)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	8	135.86
(1,194)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	18	135.86
(1,658)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	13	135.71
(1,489)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	1	135.7
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	15	135.7
(1,183)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	9	135.67
(1,201)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	4	135.66
(1,482)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	6	135.65
(1,399)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	5	135.65
(1,525)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	4	135.62
(1,555)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	9	135.6
(1,284)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	3	135.58
(1,579)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	13	135.51
(1,308)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	16	135.51
(1,455)	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	1:A:86:ARG:CD	14	135.42
(1,539)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	13	135.39
(1,470)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	14	135.37
(1,463)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	12	135.35
(1,386)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	12	135.33
(1,397)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	11	135.31
(1,397)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	20	135.31
(1,374)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	19	135.3
(1,662)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	11	135.26
(1,513)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	7	135.21
(1,373) $(1,373)$	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	1:A:60:ARG:CD	11	135.2
(1,651)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	6	135.12
(1,001) $(1,249)$	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	11	135.12
(1,525)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	7	135.07
(1,520) $(1,520)$	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	7	135.06
(1,670)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	13	135.05
(1,576) $(1,586)$	1:A:135:EEO.CA 1:A:135:TYR:N	1:A:135:EEC.CB	1:A:135:EE0.CG 1:A:135:TYR:CB	1:A:135:EE0.CD1 1:A:135:TYR:CG	20	135.05
(1,380) $(1,188)$	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	14	135.02
(1,188) $(1,533)$	1:A:116:LEU:N	1:A:3:C15:CA 1:A:116:LEU:CA	1:A:3:C15:CB 1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	14	134.99
(1,000)	1.A.110:LEU:N	1.A.110.LEU.UA	1.A.110.LEU.OD	1.A.110.LEU.CG		134.99



(1,622)	Atom-1 1:A:90:GLY:N 1:A:30:GLU:N 1:A:11:LEU:CA	Atom-2 1:A:90:GLY:CA	Atom-3 1:A:90:GLY:C	Atom-4 1:A:91:LEU:N	Model 12	Violation (°)
(1,274) (1,219) (1,463) (1,652) (1,622)	1:A:30:GLU:N			1.A.31.DDO.N	12	134.98
(1,219) (1,463) (1,652) (1,622)		1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	16	134.96
(1,463) (1,652) (1,622)		1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	16	134.96
(1,652) (1,622)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	2	134.95
(1,622)	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	1:A:150:ARG:CD	14	134.91
· · /	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	16	134.91
(1,530)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	7	134.91
(1,509)	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	20	134.9
	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	1:A:148:ARG:CD	20	134.85
(1,490)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	16	134.73
(1,542)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	15	134.69
(1,167)	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	1:A:1:MET:SD	15	134.69
(1,478)	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	17	134.68
(1,397)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	4	134.68
(1,536)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	12	134.64
(1,603)	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:CB	1:A:138:ASN:CG	6	134.63
(1,167)	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	1:A:1:MET:SD	16	134.63
(1,597)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	5	134.6
(1,167)	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	1:A:1:MET:SD	11	134.6
(1,311)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	9	134.57
(1,580)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	14	134.55
(1,669)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	3	134.54
(1,311)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	14	134.51
(1,397)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	9	134.5
(1,360)	1:A:54:SER:C	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	18	134.5
(1,222)	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	1:A:12:LYS:CD	7	134.49
(1,581)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	20	134.48
(' /	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	20	134.46
(1,324)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	19	134.45
(1,267)	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	1:A:28:MET:SD	17	134.45
(1,221)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	6	134.38
(1,289)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	14	134.37
· · /	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	1:A:28:MET:SD	6	134.37
(1,471)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	6	134.36
	1:A:117:MET:CA		1:A:117:MET:CG	1:A:117:MET:SD	9	134.35
(1,251)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	5	134.35
· · /	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	1:A:28:MET:SD	16	134.33
(, ,	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	1:A:150:ARG:CD	1	134.32
(1,622)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	8	134.32
(1,386)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	13	134.31
/	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	10	134.29
(1,560)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	6	134.29
(1,254)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	13	134.29
/	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	13	134.26
(1,183)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	13	134.24
(1,221)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	14	134.23
(1,482)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	4	134.2
(1,255)	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	1:A:23:ARG:CD	6	134.2
(1,414)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	16	134.17
(1,255)	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	1:A:23:ARG:CD	17	134.17
(1,167)	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	1:A:1:MET:SD	5	134.15



	ed from previous pag Atom-1	Atom-2	A 4 9	A 4 4	Model	17: -1-4: (-)
Key			Atom-3	Atom-4		Violation (°)
(1,189)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	17	134.12
(1,251)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	7	134.11
(1,515)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	6	134.1
(1,597)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	10	134.09
(1,281)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	6	134.09
(1,555)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	15	134.07
(1,525)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	13	134.06
(1,525)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	19	134.03
(1,495)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	14	134.03
(1,360)	1:A:54:SER:C	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	17	134.03
(1,167)	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	1:A:1:MET:SD	3	134.01
(1,552)	1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:CA	1:A:123:ASN:CB	1:A:123:ASN:CG	9	133.99
(1,331)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	20	133.99
(1,652)	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	1:A:150:ARG:CD	10	133.95
(1,229)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	2	133.94
(1,388)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	7	133.92
(1,663)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	15	133.91
(1,538)	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	1:A:117:MET:SD	12	133.89
(1,535)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	1	133.85
(1,497)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	17	133.85
(1,311)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	13	133.85
(1,229)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	10	133.85
(1,360)	1:A:54:SER:C	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	3	133.82
(1,491)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	15	133.78
(1,495)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	12	133.75
(1,173)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	4	133.75
(1,317)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1	133.73
(1,533)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	12	133.72
(1,538)	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	1:A:117:MET:SD	4	133.71
(1,408)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	12	133.7
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	5	133.68
(1,658)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	3	133.67
(1,311)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	8	133.67
(1,525)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	18	133.65
(1,472)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	16	133.64
(1,652)	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	1:A:150:ARG:CD	19	133.63
(1,495)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	2	133.63
(1,252)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	20	133.62
(1,579)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	4	133.6
(1,226)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	11	133.58
(1,267)	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	1:A:28:MET:SD	19	133.57
(1,252)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	2	133.57
(1,267)	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	1:A:28:MET:SD	8	133.54
(1,167)	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	1:A:1:MET:SD	17	133.54
(1,309)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	14	133.52
(1,405)	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	1:A:70:GLU:CD	14	133.51
(1,397)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	10	133.5
(1,251)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	3	133.49
(1,415)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	8	133.47
(1,586)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	2	133.46
(1,183)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	14	133.45



	ed from previous pag		A	A / A	N. F. 1. 1	T 7* 1 4* ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,347)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	5	133.41
(1,251)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	1	133.4
(1,191)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	8	133.4
(1,471)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	19	133.37
(1,497)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	1	133.35
(1,255)	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	1:A:23:ARG:CD	15	133.33
(1,470)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	4	133.32
(1,311)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	17	133.32
(1,387)	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	1:A:64:MET:SD	20	133.29
(1,292)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	18	133.29
(1,167)	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	1:A:1:MET:SD	10	133.28
(1,534)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	16	133.25
(1,495)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	6	133.25
(1,294)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	12	133.24
(1,652)	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	1:A:150:ARG:CD	13	133.23
(1,533)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	17	133.21
(1,301)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	6	133.19
(1,360)	1:A:54:SER:C	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	11	133.17
(1,538)	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	1:A:117:MET:SD	19	133.15
(1,581)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	3	133.14
(1,659)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	8	133.12
(1,463)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	5	133.12
(1,289)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	20	133.12
(1,281)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	14	133.11
(1,505)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	18	133.07
(1,523)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	20	133.06
(1,515)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	18	133.06
(1,267)	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	1:A:28:MET:SD	1	133.06
(1,472)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	8	133.03
(1,581)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	11	133.02
(1,547)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	11	133.02
(1,208)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	18	133.02
(1,538)	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	1:A:117:MET:SD	7	133.01
(1,579)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	19	133.0
(1,526)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	9	132.98
(1,495)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	4	132.98
(1,284)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	6	132.96
(1,454)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	19	132.95
(1,495)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	3	132.94
(1,541)	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	1:A:118:LYS:CD	16	132.86
(1,311) $(1,311)$	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	20	132.86
(1,511) $(1,580)$	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	3	132.85
(1,349)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	19	132.85
(1,243) $(1,243)$	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	3	132.85
(1,243) $(1,293)$	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	2	132.84
(1,310)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	4	132.82
(1,310) $(1,284)$	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	2	132.82
(1,234) $(1,471)$	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	9	132.82
(1,471) $(1,581)$	1:A:134:ILE:CA	1:A:91:LEU:CB 1:A:134:ILE:CB	1:A:91:LE0:CG 1:A:134:ILE:CG1	1:A:91:LEU:CD1 1:A:134:ILE:CD1	9	132.78
· · /	1:A:134:1LE:CA 1:A:58:PHE:N	1:A:134:ILE:CB 1:A:58:PHE:CA	1:A:134:ILE:CG1 1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	3	132.76
(1,368)				1:A:58:PHE:CG 1:A:103:ILE:CD1		
(1,497)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:105:ILE:UDI	8	132.74



	Key	$egin{array}{c} ed \ from \ previous \ pag \ \hline oldsymbol{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,167 1.43-FMETICA							, ,
(1.44)	· · /						
(1.267) 1A.288MET.GA	` '			1:A:73:PHE:CB			
(1.381) 1:A:134-ILE-CA	,					20	
(1,242) 1.A.44-GI.N.N	,						
(1,267) 1:A-28-MET-CA	(' /						
(1,272)		1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	1:A:28:MET:SD	13	132.6
(1,664) 1:A:128-MET-CA 1:A:28-MET-CB 1:A:28-MET-CG 1:A:154-MET-SD 10 132.57		1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C		
(1,495		1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	1:A:28:MET:SD	10	
(1,226)	(1,664)	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	1:A:154:MET:SD	10	
		1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	19	
(1,505 1:A:112:VAL:N	(1,226)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	13	132.56
	· · /	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	8	
(1,509) 1:A:106:TYR:C	(' /	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1		
(1,69) 1:A:1:MET:C 1:A:2:ASP:N 1:A:2:ASP:C 2 132.41 (1,652) 1:A:150:ARG:CB 1:A:150:ARG:CB	(' /	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA		5	
(1,652)	` ' /	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C		132.41
(1,286) 1:A:34:LEU:CA							
(1,489) 1:A:101:LEU:CA 1:A:101:LEU:CB 1:A:101:LEU:CG 1:A:101:LEU:CD1 5 132:37 (1,539) 1:A:118:LYS:N 1:A:118:LYS:CA 1:A:118:LYS:CB 1:A:141:EU:CG 1 132:3 (1,226) 1:A:14:LEU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 4 132:29 (1,640) 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 19 132:28 (1,472) 1:A:19:LEU:CA 1:A:19:LEU:CG 1:A:19:LEU:CG 19 132:28 (1,474) 1:A:86:ARG:N 1:A:86:ARG:CA 1:A:86:ARG:CB 1:A:86:ARG:CB 1:A:39:LEU:CG 16 132:2 (1,544) 1:A:86:ARG:N 1:A:157:GU:CA 1:A:157:GU:CB 1:A:157:CU:CB 1:A:157:CU:CB 1:A:157:CU:CB 1:A:157:CU:CB 1:A:157:LEU:CD 18 132:2 (1,562) 1:A:127:LEU:CA 1:A:127:LEU:CB 1:A:127:LEU:CG 1:A:127:LEU:CD 18 132:2 (1,562) 1:A:127:LEU:CA 1:A:127:LEU:CB 1:A:127:LEU:CG 1:A:135:TYR:CB 1:A:135:TYR:CB 1:A:147:LEU:CDI 18		1:A:34:LEU:CA					
(1,539) 1:A:118:LYS:N 1:A:118:LYS:CA 1:A:118:LYS:CB 1:A:14:LEU:CG 1 132.3 (1,226) 1:A:14:LEU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 4 132.29 (1,640) 1:A:14:LEU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 19 132.28 (1,640) 1:A:15:LEU:CA 1:A:16:LEU:CB 1:A:19:LEU:CB 1:A:14:LEU:CD 13 132.28 (1,472) 1:A:9:LEU:CA 1:A:9:LEU:CB 1:A:9:LEU:CG 1:A:9:LEU:CD 13 132.25 (1,454) 1:A:86:ARG:N 1:A:86:ARG:CA 1:A:86:ARG:CB 1:A:86:ARG:CG 17 132.24 (1,681) 1:A:157:GLU:N 1:A:157:GLU:CA 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:GLU:CB 16 132.2 (1,562) 1:A:127:LEU:CA 1:A:127:LEU:CB 1:A:127:LEU:CG 16 132.2 (1,586) 1:A:135:TYR:N 1:A:135:TYR:CA 1:A:135:TYR:CB 1:A:135:TYR:CG 7 132.14 (1,311) 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG 1:A:42:ILE:CD 4 132.14 (1,293) 1:A:36:GLU:N 1:A:36:GLU:CB 1:A:36:GLU:CB 1:A:42:ILE:CD 4 132.14 (1,293) 1:A:36:GLU:N 1:A:7:PHE:CA 1:A:7:PHE:CB 1:A:7:PHE:CG 8 132.08 (1,466) 1:A:89:THR:C 1:A:40:IIS:CA 1:A:40:IIS:CB 1:A:		1:A:101:LEU:CA					
(1,226) 1:A:14:LEU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 4 132:29 (1,640) 1:A:147:LEU:N 1:A:147:LEU:CA 1:A:147:LEU:CB 1:A:147:LEU:CG 19 132:28 (1,472) 1:A:91:LEU:CA 1:A:147:LEU:CB 1:A:147:LEU:CD 1:A:147:LEU:CD 13 132:25 (1,454) 1:A:86:ARG:N 1:A:86:ARG:CA 1:A:86:ARG:CB 1:A:86:ARG:CG 17 132:24 (1,681) 1:A:157:GLU:N 1:A:157:GLU:CA 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:GLU:CG 16 132:2 (1,562) 1:A:127:LEU:CA 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:GLU:CG 16 132:2 (1,562) 1:A:127:LEU:CA 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:GLU:CB 1:A:127:LEU:CG 7 132:14 (1,311) 1:A:242:LE:CA 1:A:135:TYR:CB 1:A:127:LEU:CD 7 132:14 (1,311) 1:A:36:GLU:N 1:A:36:GLU:CA 1:A:36:GLU:CB 1:A:42:LE:CD1 4 132:14 (1,201) 1:A:7:PHE:N 1:A:7:PHE:CA 1:A:7:PHE:CB 1:A:7:PHE:CB							
(1,640)	,						
(1,472) 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:CB 1:A:91:LEU:CG 1:A:91:LEU:CD1 13 132.25 (1,444) 1:A:86:ARG:N 1:A:86:ARG:CA 1:A:86:ARG:CB 1:A:86:ARG:CG 17 132.24 (1,681) 1:A:157:GLU:N 1:A:157:GLU:CA 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:GLU:CG 16 132.2 (1,562) 1:A:127:LEU:CA 1:A:127:LEU:CB 1:A:127:LEU:CG 1:A:127:LEU:CD 1:A:135:TYR:CB 1:A:135:TYR:CG 7 132.14 (1,586) 1:A:135:TYR:N 1:A:135:TYR:CB 1:A:127:LEU:CD1 4 132.14 (1,311) 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 1:A:42:ILE:CD1 4 132.14 (1,291) 1:A:36:GLU:N 1:A:36:GLU:CB 1:A:36:GU:CG 9 132.13 (1,201) 1:A:7:PHE:N 1:A:7:PHE:CB 1:A:7:PHE:CG 8 132.08 (1,466) 1:A:39:GLY:N 1:A:90:GLY:CA 1:A:90:GLY:CB 1:A:40:HIS:CG 8 132.08 (1,466) 1:A:40:HIS:N 1:A:40:HIS:CA 1:A:40:HIS:CB 1:A:40:HIS:CB <t< td=""><td>· · /</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></t<>	· · /						
(1,454) 1:A:86:ARG:N 1:A:86:ARG:CA 1:A:86:ARG:CB 1:A:86:ARG:CG 17 132.24 (1,681) 1:A:157:GLU:N 1:A:157:GLU:CA 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:GLU:CG 16 132.2 (1,562) 1:A:127:LEU:CA 1:A:127:LEU:CB 1:A:127:LEU:CD 1:A:125:TYR:CB 1:A:125:TYR:CG 7 132.14 (1,586) 1:A:135:TYR:N 1:A:135:TYR:CA 1:A:135:TYR:CB 1:A:125:TYR:CG 7 132.14 (1,311) 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 1:A:42:ILE:CD1 4 132.14 (1,293) 1:A:36:GLU:N 1:A:36:GLU:CA 1:A:36:GLU:CB 1:A:40:ILE:CG 9 132.13 (1,201) 1:A:7:PHE:N 1:A:7:PHE:CA 1:A:40:GU:CB 1:A:14:GU:CB 1:A:14:GU:CB 1:A:14:GU:CB 1:A:14:GU:CB 1:A:14:GU:CB 1:A:14:GU:CB 1:A:13:GU:CB 1:A:13:GU:CB <t< td=""><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></t<>							
(1,681) 1:A:157;GLU:N 1:A:157;GLU:CA 1:A:157;GLU:CB 1:A:157;GLU:CG 16 132.2 (1,562) 1:A:127;LEU:CA 1:A:127;LEU:CB 1:A:127;LEU:CD 18 132.2 (1,586) 1:A:135;TYR:N 1:A:135;TYR:CB 1:A:135;TYR:CG 7 132.14 (1,311) 1:A:42;ILE:CA 1:A:42;ILE:CB 1:A:42;ILE:CGI 1:A:36;GLU:CG 4 132.14 (1,293) 1:A:36;GLU:CA 1:A:36;GLU:CB 1:A:36;GLU:CG 9 132.13 (1,201) 1:A:7:PHE:N 1:A:7:PHE:CA 1:A:7:PHE:CB 1:A:7:PHE:CG 8 132.08 (1,466) 1:A:89:THR:C 1:A:90:GLY:N 1:A:40:HIS:CG 1:A:40:HIS:CG 2 132.06 (1,467) 1:A:1:MET:CA 1:A:1:MET:CB							
(1,562) 1:A:127;LEU;CA 1:A:127;LEU;CB 1:A:127;LEU;CD 18 132.2 (1,586) 1:A:135;TYR;N 1:A:135;TYR;CA 1:A:135;TYR;CB 7 132.14 (1,311) 1:A:42;LLE;CA 1:A:42;LLE;CB 1:A:42;LLE;CG1 1:A:42;LLE;CD1 4 132.14 (1,293) 1:A:36;GLU;N 1:A:36;GLU;CA 1:A:36;GLU;CB 1:A:36;GLU;CG 9 132.13 (1,201) 1:A:7;PHE;N 1:A:36;GLU;CA 1:A:36;GLU;CG 9 132.13 (1,201) 1:A:7;PHE;N 1:A:36;GLU;CA 1:A:7;PHE;CG 8 132.08 (1,466) 1:A:89;THR;C 1:A:90;GLY;N 1:A:90;GLY;CA 1:A:90;GLY;C 14 132.06 (1,300) 1:A:40;HIS;N 1:A:40;HIS;CA 1:A:40;HIS;CB 1:A:40;HIS;CG 2 132.06 (1,617) 1:A:141;GLU;N 1:A:141;GLU;CA 1:A:141;GLU;CB 1:A:141;GLU;CG 5 132.01 (1,267) 1:A:28;MET;CA 1:A:39;LEU;CB 1:A:28;MET;SD 18 132.0 (1,472) 1:A:91;LEU;CA 1:A:39;LEU;							
(1,586) 1:A:135:TYR:N 1:A:135:TYR:CA 1:A:135:TYR:CB 1:A:135:TYR:CG 7 132.14 (1,311) 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 1:A:42:ILE:CD1 4 132.14 (1,293) 1:A:36:GLU:N 1:A:36:GLU:CA 1:A:36:GLU:CB 1:A:36:GLU:CG 9 132.13 (1,201) 1:A:7:PHE:N 1:A:7:PHE:CA 1:A:7:PHE:CB 1:A:7:PHE:CG 8 132.08 (1,466) 1:A:89:THR:C 1:A:90:GLY:N 1:A:90:GLY:CA 1:A:90:GLY:C 14 132.06 (1,300) 1:A:40:HIS:N 1:A:40:HIS:CA 1:A:1:MET:CG 1:A:1:MET:SD 4 132.06 (1,167) 1:A:1:MET:CA 1:A:1:MET:CB 1:A:1:MET:CG 1:A:1:MET:SD 4 132.03 (1,613) 1:A:14:GLU:N 1:A:14:GLU:CA 1:A:14:GLU:CB 1:A:14:GLU:CG 5 132.01 (1,627) 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:CB 1:A:28:MET:CG 1:A:29:LEU:CD 3 131.99 (1,540) 1:A:31:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 1:A:31:LEU:CD <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>							
(1,311) 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 1:A:42:ILE:CD1 4 132.14 (1,293) 1:A:36:GLU:N 1:A:36:GLU:CA 1:A:36:GLU:CB 1:A:36:GLU:CG 9 132.13 (1,201) 1:A:7:PHE:N 1:A:7:PHE:CA 1:A:7:PHE:CB 1:A:7:PHE:CG 8 132.08 (1,466) 1:A:89:THR:C 1:A:90:GLY:N 1:A:90:GLY:CA 1:A:90:GLY:C 14 132.06 (1,300) 1:A:40:HIS:N 1:A:40:HIS:CA 1:A:40:HIS:CB 1:A:40:HIS:CG 2 132.06 (1,167) 1:A:1:MET:CA 1:A:1:MET:CB 1:A:1:MET:SD 4 132.03 (1,613) 1:A:141:GLU:N 1:A:141:GLU:CA 1:A:141:GLU:CB 1:A:141:GLU:CG 5 132.01 (1,267) 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:CB 1:A:28:MET:SD 18 132.0 (1,472) 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:CB 1:A:91:LEU:CG 1:A:91:LEU:CD1 3 131.99 (1,586) 1:A:135:TYR:N 1:A:135:TYR:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:							
(1,293) 1:A:36:GLU:N 1:A:36:GLU:CA 1:A:36:GLU:CB 1:A:36:GLU:CG 9 132.13 (1,201) 1:A:7:PHE:N 1:A:7:PHE:CA 1:A:7:PHE:CB 1:A:7:PHE:CG 8 132.08 (1,466) 1:A:89:THR:C 1:A:90:GLY:N 1:A:90:GLY:CA 1:A:90:GLY:C 14 132.06 (1,300) 1:A:40:HIS:N 1:A:40:HIS:CB 1:A:40:HIS:CG 2 132.06 (1,167) 1:A:1:MET:CA 1:A:1:MET:CB 1:A:1:MET:CG 1:A:1:MET:SD 4 132.03 (1,613) 1:A:141:GLU:CA 1:A:141:GLU:CB 1:A:141:GLU:CB 1:A:141:GLU:CG 5 132.01 (1,267) 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:CB 1:A:28:MET:SD 18 132.0 (1,472) 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:CB 1:A:91:LEU:CG 1:A:91:LEU:CD1 3 131.99 (1,586) 1:A:135:TYR:N 1:A:33:EU:CB 1:A:43:LEU:CB 1:A:4113:							
(1,466) 1:A:89:THR:C 1:A:90:GLY:N 1:A:90:GLY:CA 1:A:90:GLY:C 14 132.06 (1,300) 1:A:40:HIS:N 1:A:40:HIS:CA 1:A:40:HIS:CB 1:A:40:HIS:CG 2 132.06 (1,167) 1:A:1:MET:CA 1:A:1:MET:CB 1:A:1:MET:CG 1:A:1:MET:SD 4 132.03 (1,613) 1:A:141:GLU:N 1:A:141:GLU:CA 1:A:141:GLU:CB 1:A:141:GLU:CG 5 132.01 (1,267) 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:CB 1:A:28:MET:CG 1:A:28:MET:SD 18 132.0 (1,472) 1:A:91:LEU:CA 1:A:391:LEU:CB 1:A:91:LEU:CG 1:A:391:LEU:CD 3 131.99 (1,586) 1:A:135:TYR:N 1:A:135:TYR:CA 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CG 1:A:43:LEU:CG 14 131.98 (1,471) 1:A:91:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 1:A:43:LEU:CD 14 131.98 (1,527) 1:A:113:TYR:N 1:A:113:TYR:CA 1:A:113:TYR:CB 1:A:4113:TYR:CG 2 131.94 (1,279) 1:A:31:LEU:CA 1:A:42:ILE:CB 1	(, ,					9	
(1,300) 1:A:40:HIS:N 1:A:40:HIS:CA 1:A:40:HIS:CB 1:A:40:HIS:CG 2 132.06 (1,167) 1:A:1:MET:CA 1:A:1:MET:CB 1:A:1:MET:CG 1:A:1:MET:SD 4 132.03 (1,613) 1:A:141:GLU:N 1:A:141:GLU:CA 1:A:141:GLU:CB 1:A:141:GLU:CG 5 132.01 (1,267) 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:CB 1:A:28:MET:CG 1:A:28:MET:SD 18 132.0 (1,472) 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:CB 1:A:91:LEU:CG 1:A:91:LEU:CD1 3 131.99 (1,586) 1:A:135:TYR:N 1:A:135:TYR:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 14 131.98 (1,317) 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 14 131.98 (1,471) 1:A:91:LEU:CA 1:A:31:TYR:CA 1:A:113:TYR:CB 1:A:113:TYR:CG 2 131.96 (1,527) 1:A:31:LEU:CA 1:A:31:LEU:CB 1:A:42:ILE:CB 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CB	(1,201)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	8	132.08
(1,300) 1:A:40:HIS:N 1:A:40:HIS:CA 1:A:40:HIS:CB 1:A:40:HIS:CG 2 132.06 (1,167) 1:A:1:MET:CA 1:A:1:MET:CB 1:A:1:MET:CG 1:A:1:MET:SD 4 132.03 (1,613) 1:A:141:GLU:N 1:A:141:GLU:CA 1:A:141:GLU:CB 1:A:141:GLU:CG 5 132.01 (1,267) 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:CB 1:A:28:MET:CG 1:A:28:MET:SD 18 132.0 (1,472) 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:CB 1:A:91:LEU:CG 1:A:91:LEU:CD1 3 131.99 (1,586) 1:A:135:TYR:N 1:A:135:TYR:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 14 131.98 (1,317) 1:A:43:LEU:CA 1:A:49:LEU:CB 1:A:49:LEU:CB 1:A:49:LEU:CB 1:A:49:LEU:CD 2 131.96 (1,471) 1:A:31:LEU:CA 1:A:31:LEU:CB 1:A:4113:TYR:CB 1:A:113:TYR:CG 2 131.94 (1,527) 1:A:31:LEU:N 1:A:31:LEU:CB 1:A:4113:TYR:CB 1:A:31:LEU:CG 1 31.94 (1,311) 1:	(1,466)	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	14	132.06
(1,613) 1:A:141:GLU:N 1:A:141:GLU:CA 1:A:141:GLU:CB 1:A:141:GLU:CG 5 132.01 (1,267) 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:CB 1:A:28:MET:CG 1:A:28:MET:SD 18 132.0 (1,472) 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:CB 1:A:91:LEU:CG 1:A:91:LEU:CD1 3 131.99 (1,586) 1:A:135:TYR:N 1:A:135:TYR:CA 1:A:135:TYR:CB 1:A:135:TYR:CG 16 131.98 (1,317) 1:A:43:LEU:N 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 14 131.98 (1,471) 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:CB 1:A:91:LEU:CG 1:A:91:LEU:CD1 2 131.96 (1,527) 1:A:113:TYR:N 1:A:113:TYR:CA 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CG 13 131.94 (1,279) 1:A:31:LEU:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CD1 7 131.93 (1,354) 1:A:51:LYS:CA 1:A:51:LYS:CB 1:A:51:LYS:CD 5 131.89 (1,542) 1:A:119:TRP:N	(1,300)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	2	132.06
(1,613) 1:A:141:GLU:N 1:A:141:GLU:CA 1:A:141:GLU:CB 1:A:141:GLU:CG 5 132.01 (1,267) 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:CB 1:A:28:MET:CG 1:A:28:MET:SD 18 132.0 (1,472) 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:CB 1:A:91:LEU:CG 1:A:91:LEU:CD1 3 131.99 (1,586) 1:A:135:TYR:N 1:A:135:TYR:CA 1:A:135:TYR:CB 1:A:135:TYR:CG 16 131.98 (1,317) 1:A:43:LEU:N 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 14 131.98 (1,471) 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:CB 1:A:91:LEU:CG 1:A:91:LEU:CD1 2 131.96 (1,527) 1:A:113:TYR:N 1:A:113:TYR:CA 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CG 131.94 (1,279) 1:A:31:LEU:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CD1 7 131.93 (1,344) 1:A:42:ILE:CA 1:A:51:LYS:CB 1:A:51:LYS:CD 5 131.89 (1,354) 1:A:119:TRP:N 1:A:119:TRP:CA		1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	1:A:1:MET:SD	4	132.03
(1,472) 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:CB 1:A:91:LEU:CG 1:A:91:LEU:CD1 3 131.99 (1,586) 1:A:135:TYR:N 1:A:135:TYR:CA 1:A:135:TYR:CB 1:A:135:TYR:CG 16 131.98 (1,317) 1:A:43:LEU:N 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 14 131.98 (1,471) 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:CB 1:A:91:LEU:CD1 2 131.96 (1,471) 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:CB 1:A:91:LEU:CD1 2 131.96 (1,527) 1:A:113:TYR:N 1:A:113:TYR:CA 1:A:113:TYR:CB 1:A:113:TYR:CG 2 131.94 (1,279) 1:A:31:LEU:N 1:A:31:LEU:CA 1:A:31:LEU:CB 1:A:42:ILE:CG 13 131.94 (1,311) 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 1:A:42:ILE:CD1 7 131.93 (1,542) 1:A:119:TRP:N 1:A:119:TRP:CA 1:A:119:TRP:CB 1:A:119:TRP:CG 2 131.87 (1,397) 1:A:68:THR:N 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:CB 1:A:68:THR:OG1 16 13	(1,613)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	5	132.01
(1,472) 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:CB 1:A:91:LEU:CG 1:A:91:LEU:CD1 3 131.99 (1,586) 1:A:135:TYR:N 1:A:135:TYR:CA 1:A:135:TYR:CB 1:A:135:TYR:CG 16 131.98 (1,317) 1:A:43:LEU:N 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 14 131.98 (1,471) 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:CB 1:A:91:LEU:CD1 2 131.96 (1,471) 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:CB 1:A:91:LEU:CD1 2 131.96 (1,527) 1:A:113:TYR:N 1:A:113:TYR:CA 1:A:113:TYR:CB 1:A:113:TYR:CG 2 131.94 (1,279) 1:A:31:LEU:N 1:A:31:LEU:CA 1:A:31:LEU:CB 1:A:42:ILE:CG 13 131.94 (1,311) 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 1:A:42:ILE:CD1 7 131.93 (1,542) 1:A:119:TRP:N 1:A:119:TRP:CA 1:A:119:TRP:CB 1:A:119:TRP:CG 2 131.87 (1,397) 1:A:68:THR:N 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:CB 1:A:68:THR:OG1 16 13	(1,267)	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	1:A:28:MET:SD	18	132.0
(1,317) 1:A:43:LEU:N 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 14 131.98 (1,471) 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:CB 1:A:91:LEU:CG 1:A:91:LEU:CD1 2 131.96 (1,527) 1:A:113:TYR:N 1:A:113:TYR:CA 1:A:113:TYR:CB 1:A:113:TYR:CG 2 131.94 (1,279) 1:A:31:LEU:N 1:A:31:LEU:CA 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CG 13 131.94 (1,311) 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 1:A:42:ILE:CD1 7 131.93 (1,354) 1:A:51:LYS:CA 1:A:51:LYS:CB 1:A:51:LYS:CG 1:A:51:LYS:CD 5 131.89 (1,542) 1:A:119:TRP:N 1:A:119:TRP:CA 1:A:119:TRP:CB 1:A:119:TRP:CG 2 131.87 (1,397) 1:A:68:THR:N 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:CB 1:A:68:THR:OG1 16 131.87 (1,293) 1:A:3:PHE:N 1:A:3:PHE:CA 1:A:3:PHE:C 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CB (1,467) 1:A:90:GLY:N 1:A:90:GLY:CA 1:A:42:ILE:CG1		1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG		3	
(1,317) 1:A:43:LEU:N 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 14 131.98 (1,471) 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:CB 1:A:91:LEU:CG 1:A:91:LEU:CD1 2 131.96 (1,527) 1:A:113:TYR:N 1:A:113:TYR:CA 1:A:113:TYR:CB 1:A:113:TYR:CG 2 131.94 (1,279) 1:A:31:LEU:N 1:A:31:LEU:CA 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CG 13 131.94 (1,311) 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 1:A:42:ILE:CD1 7 131.93 (1,354) 1:A:51:LYS:CA 1:A:51:LYS:CB 1:A:51:LYS:CG 1:A:51:LYS:CD 5 131.89 (1,542) 1:A:119:TRP:N 1:A:119:TRP:CA 1:A:119:TRP:CB 1:A:119:TRP:CG 2 131.87 (1,397) 1:A:68:THR:N 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:CB 1:A:68:THR:OG1 16 131.87 (1,293) 1:A:36:GLU:N 1:A:36:GLU:CA 1:A:36:GLU:CB 1:A:46:GLU:N 10 131.85 (1,467) 1:A:90:GLY:N 1:A:90:GLY:CA <t< td=""><td>(1,586)</td><td>1:A:135:TYR:N</td><td>1:A:135:TYR:CA</td><td>1:A:135:TYR:CB</td><td>1:A:135:TYR:CG</td><td>16</td><td>131.98</td></t<>	(1,586)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	16	131.98
(1,527) 1:A:113:TYR:N 1:A:113:TYR:CA 1:A:113:TYR:CB 1:A:113:TYR:CG 2 131.94 (1,279) 1:A:31:LEU:N 1:A:31:LEU:CA 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CG 13 131.94 (1,311) 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 1:A:42:ILE:CD1 7 131.93 (1,354) 1:A:51:LYS:CA 1:A:51:LYS:CB 1:A:51:LYS:CG 1:A:51:LYS:CD 5 131.89 (1,542) 1:A:119:TRP:N 1:A:119:TRP:CA 1:A:119:TRP:CB 1:A:119:TRP:CG 2 131.87 (1,397) 1:A:68:THR:N 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:CB 1:A:68:THR:OG1 16 131.87 (1,293) 1:A:36:GLU:N 1:A:36:GLU:CA 1:A:36:GLU:CB 1:A:36:GLU:CG 1 131.87 (1,179) 1:A:3:PHE:N 1:A:3:PHE:CA 1:A:3:PHE:C 1:A:42:ILE:CD 1:A:49:ILEU:N 9 131.84 (1,311) 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 1:A:42:ILE:CD1 15 131.82 (1,562) 1:A:127:LEU:CA <th< td=""><td>, ,</td><td>1:A:43:LEU:N</td><td>1:A:43:LEU:CA</td><td>1:A:43:LEU:CB</td><td>1:A:43:LEU:CG</td><td>14</td><td>131.98</td></th<>	, ,	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	14	131.98
(1,279) 1:A:31:LEU:N 1:A:31:LEU:CA 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CG 13 131.94 (1,311) 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 1:A:42:ILE:CD1 7 131.93 (1,354) 1:A:51:LYS:CA 1:A:51:LYS:CB 1:A:51:LYS:CG 1:A:51:LYS:CD 5 131.89 (1,542) 1:A:119:TRP:N 1:A:119:TRP:CA 1:A:119:TRP:CB 1:A:119:TRP:CG 2 131.87 (1,397) 1:A:68:THR:N 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:CB 1:A:68:THR:OG1 16 131.87 (1,293) 1:A:36:GLU:N 1:A:36:GLU:CB 1:A:36:GLU:CG 1 131.87 (1,779) 1:A:3:PHE:N 1:A:3:PHE:CA 1:A:3:PHE:C 1:A:4:GLU:N 10 131.85 (1,467) 1:A:90:GLY:N 1:A:90:GLY:CA 1:A:490:GLY:C 1:A:491:LEU:N 9 131.84 (1,311) 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:127:LEU:CG 1:A:127:LEU:CD1 1 131.81	(1,471)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	2	131.96
(1,279) 1:A:31:LEU:N 1:A:31:LEU:CA 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CG 13 131.94 (1,311) 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 1:A:42:ILE:CD1 7 131.93 (1,354) 1:A:51:LYS:CA 1:A:51:LYS:CB 1:A:51:LYS:CG 1:A:51:LYS:CD 5 131.89 (1,542) 1:A:119:TRP:N 1:A:119:TRP:CA 1:A:119:TRP:CB 1:A:119:TRP:CG 2 131.87 (1,397) 1:A:68:THR:N 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:CB 1:A:68:THR:OG1 16 131.87 (1,293) 1:A:36:GLU:N 1:A:36:GLU:CB 1:A:36:GLU:CG 1 131.87 (1,779) 1:A:3:PHE:N 1:A:3:PHE:CA 1:A:3:PHE:C 1:A:4:GLU:N 10 131.85 (1,467) 1:A:90:GLY:N 1:A:90:GLY:CA 1:A:490:GLY:C 1:A:491:LEU:N 9 131.84 (1,311) 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:127:LEU:CG 1:A:127:LEU:CD1 1 131.81	· · /				1:A:113:TYR:CG	2	
(1,311) 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 1:A:42:ILE:CD1 7 131.93 (1,354) 1:A:51:LYS:CA 1:A:51:LYS:CB 1:A:51:LYS:CG 1:A:51:LYS:CD 5 131.89 (1,542) 1:A:119:TRP:N 1:A:119:TRP:CA 1:A:119:TRP:CB 1:A:119:TRP:CG 2 131.87 (1,397) 1:A:68:THR:N 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:CB 1:A:68:THR:OG1 16 131.87 (1,293) 1:A:36:GLU:N 1:A:36:GLU:CA 1:A:36:GLU:CB 1:A:36:GLU:CG 1 131.87 (1,179) 1:A:3:PHE:N 1:A:3:PHE:CA 1:A:3:PHE:C 1:A:4:GLU:N 10 131.85 (1,467) 1:A:90:GLY:N 1:A:90:GLY:CA 1:A:90:GLY:C 1:A:91:LEU:N 9 131.84 (1,311) 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 1:A:42:ILE:CD1 15 131.82 (1,562) 1:A:127:LEU:CA 1:A:127:LEU:CB 1:A:127:LEU:CG 1:A:127:LEU:CD1 1 131.81	, ,					13	
(1,354) 1:A:51:LYS:CB 1:A:51:LYS:CG 1:A:51:LYS:CD 5 131.89 (1,542) 1:A:119:TRP:N 1:A:119:TRP:CA 1:A:119:TRP:CB 1:A:119:TRP:CG 2 131.87 (1,397) 1:A:68:THR:N 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:CB 1:A:68:THR:OG1 16 131.87 (1,293) 1:A:36:GLU:N 1:A:36:GLU:CA 1:A:36:GLU:CB 1:A:36:GLU:CG 1 131.87 (1,179) 1:A:3:PHE:N 1:A:3:PHE:CA 1:A:3:PHE:C 1:A:4:GLU:N 10 131.85 (1,467) 1:A:90:GLY:N 1:A:90:GLY:CA 1:A:91:LEU:N 9 131.84 (1,311) 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 1:A:42:ILE:CD1 15 131.82 (1,562) 1:A:127:LEU:CA 1:A:127:LEU:CB 1:A:127:LEU:CG 1:A:127:LEU:CD1 1 131.81	, ,						
(1,542) 1:A:119:TRP:N 1:A:119:TRP:CA 1:A:119:TRP:CB 1:A:119:TRP:CG 2 131.87 (1,397) 1:A:68:THR:N 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:CB 1:A:68:THR:OG1 16 131.87 (1,293) 1:A:36:GLU:N 1:A:36:GLU:CA 1:A:36:GLU:CB 1:A:36:GLU:CG 1 131.87 (1,179) 1:A:3:PHE:N 1:A:3:PHE:CA 1:A:3:PHE:C 1:A:4:GLU:N 10 131.85 (1,467) 1:A:90:GLY:N 1:A:90:GLY:CA 1:A:90:GLY:C 1:A:91:LEU:N 9 131.84 (1,311) 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 1:A:42:ILE:CD1 15 131.82 (1,562) 1:A:127:LEU:CA 1:A:127:LEU:CB 1:A:127:LEU:CG 1:A:127:LEU:CD1 1 131.81	, ,						
(1,397) 1:A:68:THR:N 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:CB 1:A:68:THR:OG1 16 131.87 (1,293) 1:A:36:GLU:N 1:A:36:GLU:CA 1:A:36:GLU:CB 1:A:36:GLU:CG 1 131.87 (1,179) 1:A:3:PHE:N 1:A:3:PHE:CA 1:A:3:PHE:C 1:A:4:GLU:N 10 131.85 (1,467) 1:A:90:GLY:N 1:A:90:GLY:CA 1:A:90:GLY:C 1:A:91:LEU:N 9 131.84 (1,311) 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 1:A:42:ILE:CD1 15 131.82 (1,562) 1:A:127:LEU:CA 1:A:127:LEU:CB 1:A:127:LEU:CG 1:A:127:LEU:CD1 1 131.81	· · /						
(1,293) 1:A:36:GLU:N 1:A:36:GLU:CA 1:A:36:GLU:CB 1:A:36:GLU:CG 1 131.87 (1,179) 1:A:3:PHE:N 1:A:3:PHE:CA 1:A:3:PHE:C 1:A:4:GLU:N 10 131.85 (1,467) 1:A:90:GLY:N 1:A:90:GLY:CA 1:A:90:GLY:C 1:A:91:LEU:N 9 131.84 (1,311) 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 1:A:42:ILE:CD1 15 131.82 (1,562) 1:A:127:LEU:CA 1:A:127:LEU:CB 1:A:127:LEU:CG 1:A:127:LEU:CD1 1 131.81	· · /			1:A:68:THR:CB			
(1,179) 1:A:3:PHE:N 1:A:3:PHE:CA 1:A:3:PHE:C 1:A:4:GLU:N 10 131.85 (1,467) 1:A:90:GLY:N 1:A:90:GLY:CA 1:A:90:GLY:C 1:A:91:LEU:N 9 131.84 (1,311) 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 1:A:42:ILE:CD1 15 131.82 (1,562) 1:A:127:LEU:CA 1:A:127:LEU:CB 1:A:127:LEU:CG 1:A:127:LEU:CD1 1 131.81	· · /		1:A:36:GLU:CA				
(1,467) 1:A:90:GLY:N 1:A:90:GLY:CA 1:A:90:GLY:C 1:A:91:LEU:N 9 131.84 (1,311) 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 1:A:42:ILE:CD1 15 131.82 (1,562) 1:A:127:LEU:CA 1:A:127:LEU:CB 1:A:127:LEU:CG 1:A:127:LEU:CD1 1 131.81	· · /						
(1,311) 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 1:A:42:ILE:CD1 15 131.82 (1,562) 1:A:127:LEU:CA 1:A:127:LEU:CB 1:A:127:LEU:CG 1:A:127:LEU:CD1 1 131.81	` ' /						
(1,562) 1:A:127:LEU:CA 1:A:127:LEU:CB 1:A:127:LEU:CG 1:A:127:LEU:CD1 1 131.81	· · /						
	· · /						
	· · /					12	



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,467)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	20	131.8
(1,651)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	16	131.78
(1,311)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	18	131.78
(1,664)	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	1:A:154:MET:SD	7	131.76
(1,166)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	14	131.76
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	8	131.69
(1,581)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	7	131.68
(1,555)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	11	131.68
(1,518)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	6	131.64
(1,497)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	4	131.64
(1,379)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	11	131.63
(1,495)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	7	131.62
(1,266)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	1	131.62
(1,581)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	17	131.61
(1,509)	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	1	131.61
(1,304)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:CB	1:A:41:ASP:CG	14	131.61
(1,243)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	8	131.59
(1,311)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	10	131.58
(1,220)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	10	131.58
(1,208)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	4	131.55
(1,579)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	11	131.54
(1,581)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	19	131.53
(1,312)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	1	131.51
(1,251)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	8	131.5
(1,373)	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	1:A:60:ARG:CD	12	131.47
(1,679)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	7	131.44
(1,647)	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	1:A:148:ARG:CD	9	131.43
(1,466)	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	9	131.42
(1,454)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	11	131.39
(1,289)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	12	131.39
(1,489)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	10	131.37
(1,682)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	3	131.33
(1,595)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	5	131.33
(1,497)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	14	131.32
(1,267)	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	1:A:28:MET:SD	15	131.32
(1,561)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	7	131.29
(1,685)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	1	131.24
(1,581)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	2	131.24
(1,167)	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	1:A:1:MET:SD	8	131.23
(1,648)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	2	131.19
(1,368)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	17	131.18
(1,539)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	3	131.16
(1,497)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	10	131.15
(1,477) $(1,472)$	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	20	131.13
(1,472) $(1,495)$	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	15	131.12
(1,397)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	5	131.12
(1,386)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	7	131.11
(1,530) $(1,518)$	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	3	131.09
(1,318) $(1,247)$	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	1	131.08
$\frac{(1,247)}{(1,664)}$	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	1:A:21:LEO:CD1 1:A:154:MET:SD	20	131.05
(1,004) $(1,581)$	1:A:134:ME1:CA 1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ME1:CB	1:A:134:ME1:CG 1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ME1:SD 1:A:134:ILE:CD1	12	131.03
(1,001)	1.A.104.ILE.UA	1.A.104.ILE.UD	1.A.194.ILE:UGI	1.A.194.ILE.UDI		ed on nert nage



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	17	130.99
(1,297)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	20	130.96
(1,399)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	13	130.95
(1,664)	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	1:A:154:MET:SD	12	130.93
(1,659)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	18	130.92
(1,360)	1:A:54:SER:C	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	6	130.92
(1,347)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	8	130.91
(1,542)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	20	130.89
(1,470)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	18	130.88
(1,542)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	11	130.86
(1,285)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	13	130.86
(1,673)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	5	130.85
(1,673)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	4	130.82
(1,387)	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	1:A:64:MET:SD	9	130.82
(1,670)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	10	130.79
(1,538)	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	1:A:117:MET:SD	13	130.73
(1,523)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	11	130.71
(1,241)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	3	130.71
(1,518)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	18	130.66
(1,518)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	16	130.65
(1,468)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	13	130.61
(1,495)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	5	130.6
(1,455)	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	1:A:86:ARG:CD	7	130.58
(1,515)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	16	130.57
(1,581)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	5	130.5
(1,389)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	2	130.48
(1,515)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	20	130.45
(1,311)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	11	130.44
(1,262)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	18	130.42
(1,310)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	17	130.4
(1,318)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	19	130.35
(1,354)	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	1:A:51:LYS:CD	3	130.33
(1,364) $(1,247)$	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	6	130.33
(1,579)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	8	130.29
(, ,			1:A:117:MET:CG	1:A:117:MET:SD	11	130.29
(1,386)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	10	130.27
(1,360) $(1,267)$	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	1:A:28:MET:SD	3	130.27
(1,207) $(1,518)$	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	8	130.26
(1,318) $(1,293)$	1:A:36:GLU:N	1:A:109:ILE:CB	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	10	130.26
$\frac{(1,293)}{(1,300)}$	1:A:30:GLU:N 1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG		130.25
	1:A:40:HIS:N 1:A:106:TYR:N	1:A:40:HIS:CA 1:A:106:TYR:CA	1:A:40:HIS:CB 1:A:106:TYR:CB	1:A:40:HIS:CG 1:A:106:TYR:CG	15	
(1,505)					17	130.13
(1,372)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG 1:A:153:LEU:CD1	20	130.12
(1,658)	1:A:153:LEU:CA 1:A:94:SER:C	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG		5	130.09 130.08
(1,478)		1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	12	
(1,527)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	19	130.04
(1,524)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	2	130.03
(1,678)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	19	130.02
(1,218)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	3	130.01
(1,664)	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	1:A:154:MET:SD	4	129.99
(1,644)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	1:A:148:ARG:N	14	129.99
(1,466)	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	19	129.98



	ed from previous pag			.	36 11	T70 1 .0 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,538)	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	1:A:117:MET:SD	1	129.97
(1,267)	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	1:A:28:MET:SD	12	129.95
(1,378)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	19	129.92
(1,505)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	11	129.91
(1,495)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1	129.91
(1,641)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	14	129.89
(1,594)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	20	129.89
(1,533)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	10	129.88
(1,315)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	4	129.83
(1,252)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	6	129.82
(1,505)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	15	129.78
(1,311)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	2	129.78
(1,489)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	12	129.74
(1,255)	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	1:A:23:ARG:CD	14	129.72
(1,372)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	4	129.68
(1,165)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	2	129.68
(1,467)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	3	129.67
(1,603)	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:CB	1:A:138:ASN:CG	20	129.65
(1,289)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	13	129.65
(1,576)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	7	129.62
(1,538)	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	1:A:117:MET:SD	8	129.61
(1,555)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	3	129.6
(1,579)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	15	129.57
(1,680)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	17	129.56
(1,274)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	14	129.56
(1,322)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	8	129.55
(1,289)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	1	129.54
(1,498)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	13	129.52
(1,293)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	13	129.5
(1,555)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	2	129.45
(1,495)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	8	129.43
(1,598)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	17	129.42
(1,593)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	14	129.41
(1,347)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	4	129.4
(1,300)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	5	129.39
(1,594)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	11	129.37
(1,526)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	5	129.36
(1,671)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	11	129.33
(1,246)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	20	129.29
(1,470)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	11	129.28
(1,394)	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	10	129.27
(1,289)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	6	129.25
(1,281)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	4	129.23
(1,478)	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	6	129.2
(1,686)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	2	129.19
(1,682)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	10	129.09
(1,289)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	16	129.07
(1,285)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	19	129.06
(1,657)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	14	128.97
(1,520)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	18	128.88
(1,547)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	4	128.83
(1,011)	1.11.121.1101 .11	1.11.121.11.01.01		1.11.121.11.01 .00		ad an nant naga



	ed from previous pag Atom-1	Atom-2	Atom 9	Atom 1	Model	Violetien (a)
(1, 422)			Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,433)	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	1:A:79:GLY:CA	1:A:79:GLY:C	13	128.81
(1,564)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	5	128.79
(1,322)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	20	128.77
(1,680)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	12	128.74
(1,301)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	4	128.73
(1,311)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	16	128.72
(1,314)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	7	128.71
(1,466)	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	2	128.7
(1,246)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	12	128.69
(1,218)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	19	128.68
(1,554)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	6	128.66
(1,603)	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:CB	1:A:138:ASN:CG	11	128.6
(1,562)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	9	128.59
(1,509)	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	7	128.58
(1,495)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	10	128.5
(1,241)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	10	128.49
(1,347)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	11	128.46
(1,246)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	19	128.45
(1,676)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	4	128.44
(1,241)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	6	128.44
(1,169)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	15	128.44
(1,433)	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	1:A:79:GLY:CA	1:A:79:GLY:C	11	128.43
(1,354)	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	1:A:51:LYS:CD	20	128.42
(1,642)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	7	128.41
(1,267)	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	1:A:28:MET:SD	11	128.38
(1,661)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	18	128.37
(1,518)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	1	128.29
(1,595)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	1	128.27
(1,322)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	10	128.27
(1,506)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	1	128.24
(1,322)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	11	128.22
(1,641)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	4	128.2
(1,208)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	8	128.19
(1,322)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	2	128.18
(1,555)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	5	128.17
(1,467)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	8	128.14
(1,354)	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	1:A:51:LYS:CD	16	128.14
(1,661)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	11	128.04
(1,566)	1:A:128:SER:C	1:A:129:GLY:N	1:A:129:GLY:CA	1:A:129:GLY:C	19	128.02
(1,518)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	13	127.99
(1,241)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	8	127.99
(1,527)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	11	127.93
(1,509)	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	17	127.93
(1,554)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	17	127.87
(1,336)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	2	127.85
(1,227)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	8	127.85
(1,243)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	5	127.79
(1,554)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	4	127.77
, ,						
· · /						
· · /			I			
(1,647) $(1,677)$ $(1,312)$	1:A:148:ARG:CA 1:A:156:HIS:N 1:A:42:ILE:CA	1:A:148:ARG:CB 1:A:156:HIS:CA 1:A:42:ILE:CB	1:A:148:ARG:CG 1:A:156:HIS:CB 1:A:42:ILE:CG1	1:A:148:ARG:CD 1:A:156:HIS:CG 1:A:42:ILE:CD1	15 20 19	127.74 127.72 127.72



Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,340)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	6	127.64
(1,613)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	3	127.6
(1,309)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	20	127.58
(1,187)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	17	127.58
(1,523)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	10	127.51
(1,489)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	8	127.51
(1,315)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	5	127.5
(1,591)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	17	127.49
(1,373)	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	1:A:60:ARG:CD	14	127.49
(1,518)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	20	127.48
(1,685)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	18	127.44
(1,672)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	7	127.43
(1,594)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	2	127.4
(1,381) $(1,483)$	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	1:A:96:LYS:CD	20	127.39
(1,527)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	7	127.37
(1,321) $(1,221)$	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	11	127.37
(1,562)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	20	127.36
(1,302) $(1,497)$	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	20	127.34
(1,437) $(1,542)$	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	18	127.29
(1,342) $(1,315)$	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	14	127.23
(1,313) $(1,427)$	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	9	127.23
(1,427) $(1,449)$	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	4	127.21
(1,449) $(1,576)$	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	6	127.11
(1,310) $(1,311)$	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	12	127.09
(1,511) $(1,566)$	1:A:128:SER:C	1:A:129:GLY:N	1:A:129:GLY:CA	1:A:129:GLY:C	16	127.09
(1,300) $(1,305)$	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	1:A:129:GL1:C 1:A:42:ILE:N	2	127.06
(' /	1:A:41:A5P:N 1:A:71:VAL:C	1:A:41:A5F:CA 1:A:72:GLU:N	1:A:41:A5F:C 1:A:72:GLU:CA	1:A:42:ILE:N 1:A:72:GLU:C	18	127.06
(1,408)						
(1,360)	1:A:54:SER:C 1:A:73:PHE:N	1:A:55:GLY:N 1:A:73:PHE:CA	1:A:55:GLY:CA 1:A:73:PHE:CB	1:A:55:GLY:C 1:A:73:PHE:CG	5	127.05 127.03
(1,415) $(1,571)$	1:A:132:TYR:N	1:A:73:PHE:CA 1:A:132:TYR:CA	1:A:73:PHE:CB 1:A:132:TYR:CB	1:A:73:PHE:CG 1:A:132:TYR:CG	18	127.03
(, ,	1:A:52:1 1 K:N 1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	1:A:152:1 1 K:CG 1:A:51:LYS:CD		127.02
(1,354)					4	
(1,661)	1:A:153:LEU:C 1:A:21:LEU:CA	1:A:154:MET:N 1:A:21:LEU:CB	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C 1:A:21:LEU:CD1	15	126.97
(1,247)			1:A:21:LEU:CG 1:A:66:ALA:CA	1:A:21:LEU:CD1 1:A:66:ALA:C	13	126.93
(1,392)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N				126.92
(1,526)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA		1:A:113:TYR:CG	17	126.91
(1,368)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB 1:A:69:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG 1:A:69:PHE:CG	9	126.89 126.85
(1,399)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA			16	
(1,360)	1:A:54:SER:C	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	20	126.83
(1,539)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	7	126.76
(1,489)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	11	126.7
(1,262)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	7	126.7
(1,647)	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	1:A:148:ARG:CD	2	126.66
(1,518)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	10	126.6
(1,560)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	13	126.58
(1,531)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	11	126.56
(1,264)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	9	126.52
(1,521)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	12	126.49
(1,167)	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	1:A:1:MET:SD	1	126.49
(1,562)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	11	126.4
(1,293)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	7	126.4
(1,279)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	5	126.39



	ed from previous pag		A		7.6 1 1	37.1.4.
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,598)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	14	126.33
(1,264)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	3	126.29
(1,670)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	4	126.28
(1,455)	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	1:A:86:ARG:CD	10	126.24
(1,680)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	13	126.19
(1,453)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	18	126.19
(1,234)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	5	126.17
(1,642)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	12	126.07
(1,629)	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	18	126.05
(1,539)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	10	126.01
(1,664)	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	1:A:154:MET:SD	5	125.96
(1,585)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	17	125.92
(1,576)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	1	125.92
(1,275)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	18	125.9
(1,307)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	5	125.88
(1,505)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	19	125.83
(1,221)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	5	125.82
(1,526)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	10	125.75
(1,641)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1	125.74
(1,190)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	11	125.69
(1,622)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	20	125.64
(1,167)	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	1:A:1:MET:SD	18	125.64
(1,680)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	2	125.59
(1,581)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	1	125.58
(1,542)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	16	125.56
(1,322)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	15	125.52
(1,519)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	19	125.5
(1,234)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	8	125.48
(1,496)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	11	125.46
(1,488)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	2	125.42
(1,247)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	8	125.42
(1,397)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	13	125.41
(1,659)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	9	125.38
(1,392)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	18	125.38
(1,598)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	7	125.33
(1,518)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	11	125.33
(1,387)	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	1:A:64:MET:SD	18	125.3
(1,324)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	18	125.26
(1,181)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	20	125.24
(1,234)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	10	125.23
(1,354)	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	1:A:51:LYS:CD	1	125.22
(1,234)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	12	125.17
(1,336)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	6	125.15
(1,586)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	18	125.14
(1,267)	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	1:A:28:MET:SD	2	125.12
(1,591)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	10	125.09
(1,360)	1:A:54:SER:C	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	12	125.05
(1,224)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	10	125.04
(1,496)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	18	125.03
(1,234)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	6	124.97
(1,635)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	1	124.93



(1,622) (1,292) (1,580) (1,382)	1:A:142:THR:C 1:A:36:GLU:N	1:A:143:ALA:N	1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1			Violation (\circ)
(1,292) (1,580) (1,382)			1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	5	124.88
(1,580) (1,382)	1:A:50:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	3	124.88
(1,382)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	6	124.82
· · /	1:A:62:PHE:C	1:A:63:GLY:N	1:A:63:GLY:CA	1:A:63:GLY:C	14	124.81
(1,284)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	17	124.8
(1,538)	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	1:A:117:MET:SD	15	124.77
(1,267)	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	1:A:28:MET:SD	4	124.76
(1,234)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	14	124.75
(1,455)	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	1:A:86:ARG:CD	13	124.73
(1,278)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	17	124.73
(1,635)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	5	124.7
(1,247)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	5	124.63
(1,247)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	9	124.57
(1,683)	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	1:A:157:GLU:CD	14	124.4
(1,384)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	13	124.39
(1,181)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	13	124.34
(1,533)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	4	124.32
(1,466)	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	12	124.32
(1,466)	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	17	124.31
(1,531)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	15	124.3
(1,678)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	6	124.29
(1,541)	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	1:A:118:LYS:CD	8	124.29
(1,311)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	6	124.29
(1,519)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	14	124.28
(1,289)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	17	124.28
(1,267)	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	1:A:28:MET:SD	7	124.28
(1,280)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	2	124.25
(1,442)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	14	124.24
(1,652)	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	1:A:150:ARG:CD	17	124.17
(1,354)	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	1:A:51:LYS:CD	11	124.17
(1,509)	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	4	124.16
(1,264)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	20	124.15
(1,455)	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	1:A:86:ARG:CD	2	124.13
(1,328)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	10	124.11
(1,580)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	9	124.08
(1,509)	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	6	124.04
(1,268)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	13	123.98
(1,289)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	9	123.96
(1,168)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	2	123.96
(1,675)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	7	123.95
(1,264)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	17	123.94
(1,669)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	7	123.92
(1,534)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	4	123.92
(1,303)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	4	123.92
(1,661)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	6	123.82
(1,482)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	16	123.79
(1,441)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	5	123.79
(1,663)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	8	123.78
(1,427)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	13	123.78
(1,315)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	12	123.77
(-,0-0)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	4	123.77



	ed from previous pag				36 11	T70 1 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,515)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	8	123.76
(1,538)	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	1:A:117:MET:SD	20	123.75
(1,247)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	2	123.72
(1,427)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	19	123.61
(1,328)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	9	123.59
(1,639)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	7	123.58
(1,328)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	19	123.56
(1,643)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	5	123.51
(1,466)	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	15	123.51
(1,518)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	9	123.5
(1,602)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	14	123.47
(1,169)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	10	123.47
(1,538)	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	1:A:117:MET:SD	2	123.43
(1,664)	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	1:A:154:MET:SD	2	123.39
(1,515)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	19	123.35
(1,387)	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	1:A:64:MET:SD	2	123.33
(1,285)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	8	123.33
(1,468)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	11	123.32
(1,273)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	10	123.32
(1,218)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	11	123.32
(1,478)	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	2	123.31
(1,388)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	6	123.31
(1,289)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	3	123.28
(1,300)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	3	123.21
(1,634)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	19	123.17
(1,602)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	7	123.17
(1,293)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	5	123.08
(1,595)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	18	123.07
(1,234)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	18	123.07
(1,199)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	2	123.07
(1,315)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	16	123.06
(1,322)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	13	123.03
(1,392)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	9	123.0
(1,675)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	10	122.99
(1,428)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	13	122.96
(1,234)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	1	122.96
(1,555)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	1	122.88
(1,591)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	13	122.86
(1,554)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	12	122.83
(1,478)	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	4	122.82
(1,385)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	16	122.79
(1,603)	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:CB	1:A:138:ASN:CG	19	122.67
(1,234)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	15	122.61
(1,581)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	14	122.54
(1,656)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	2	122.53
(1,315)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	15	122.53
(1,319) $(1,249)$	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	18	122.48
(1,243) $(1,474)$	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	8	122.47
(1,322)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	14	122.46
(1,322) $(1,322)$	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA 1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	4	122.44
(1,322) $(1,664)$	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	1:A:154:MET:SD	16	122.44
(1,004)	1.11.194.WET.OA	1.71.194.ME1.CD	1.71.194.11111.00	1.11.104.1111.01		122.43



Key	A 1 -1	A	A L	A 1 4	3 /F 1 1	T7. 1 /
-	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,384)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	8	122.4
(1,234)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	19	122.4
(1,482)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	9	122.38
(1,515)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	12	122.33
(1,289)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	19	122.24
(1,518)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	15	122.19
(1,661)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	5	122.16
(1,478)	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	1	122.16
(1,384)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	9	122.13
(1,267)	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	1:A:28:MET:SD	14	122.07
(1,509)	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	16	122.05
(1,181)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	7	122.03
(1,234)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	7	121.96
(1,275)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	13	121.91
(1,242)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	12	121.89
(1,562)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	16	121.87
(1,535)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	5	121.87
(1,427)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	14	121.84
(1,382)	1:A:62:PHE:C	1:A:63:GLY:N	1:A:63:GLY:CA	1:A:63:GLY:C	11	121.77
(1,243)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	1	121.75
(1,286)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	7	121.74
(1,591)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	5	121.73
(1,537)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	3	121.72
(1,368)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	14	121.7
(1,307)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	19	121.67
(1,584)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	17	121.66
(1,467)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	2	121.62
(1,581)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	10	121.59
(1,243)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	15	121.53
(1,489)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	9	121.52
(1,519)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	17	121.44
(1,661)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	12	121.43
(1,532)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	16	121.38
(1,384)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	1	121.37
(1,249)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	12	121.35
(1,467)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	15	121.19
(1,390)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	1	121.18
(1,525)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	15	121.13
(1,315)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	10	121.08
(1,526)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	4	121.06
(1,509)	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	13	121.06
(1,408)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	10	120.95
(1,661)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	3	120.94
(1,340)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	17	120.93
(1,246)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	16	120.93
(1,387)	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	1:A:64:MET:SD	17	120.91
(1,307)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	13	120.91
(1,360)	1:A:54:SER:C	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1	120.9
, , ,	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	1:A:157:GLU:CD	7	120.87
(1.083)					· ·	
(1,683) $(1,340)$	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	11	120.87



(1.322)	Key	$egin{array}{c} ext{ed from previous pag} \ ext{ } ext{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1.328) 1:A-44-GINC							, ,
(1.392)	· · /	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	13	120.83
(1.190)	· · /	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	17	
(1.644)	,	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N		120.79
(1,447)	, ,	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA		1:A:148:ARG:N	16	
(1,315)	/	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	1:A:148:ARG:CD	14	
(1,594)	· · /	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	18	120.62
(1,581) 1:A:134:ILECA 1:A:134:ILECG 1:A:134:ILECGI 1:A:134:ILECGI 6 120.44 (1,322) 1:A:435:IEUC 1:A:44:GLN:N 1:A:44:GLN:C 9 120.41 (1,560) 1:A:153:IEUC 1:A:44:GLN:N 1:A:44:GLN:C 9 120.41 (1,560) 1:A:153:IEUC 1:A:154:MET:N 1:A:154:MET:C 1:A:154:MET:C 17 120.4 (1,222) 1:A:154:MET:C 1:A:154:MET:C 1:A:154:MET:C 17 120.4 (1,222) 1:A:154:MET:C 1:A:154:MET:C 1:A:154:MET:C 17 120.4 (1,322) 1:A:154:MET:C 1:A:154:MET:C 10 120.38 (1,389) 1:A:101:IEUCA 1:A:101:IEUCA 1:A:101:IEUCG 1:A:101:IEUCG 1:A:101:IEUCGI 1:A:101:IEUCGI 1:A:101:IEUCGI 1:A:154:MET:SD 17 120.27 (1,315) 1:A:32:IIEC 1:A:43:IEUN 1:A:33:IEUCA 1:A:43:IEUC 3 120.21 (1,315) 1:A:32:IIEC 1:A:43:IEUN 1:A:33:IEUCA 1:A:43:IEUC 13 120.21 (1,315) 1:A:12:IVS:N 1:A:12:IVS:CA 1:A:12:IVS:CA 1:A:34:IEUC 1:A:34:IEUC 1:A:34:IEUC 1:A:34:IEUC 1:A:34:IEUC 1:A:12:IVS:CA 1:A:12:IVS:CA 1:A:12:IVS:CA 1:A:12:IVS:CA 1:A:12:IVS:CA 1:A:12:IVS:CA 1:A:12:IVS:CA 1:A:12:IVS:CA 1:A:13:IEUCA 1:A	· · /	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	4	
(1,644) 1.A:147.LEUN	· · /	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	6	
(1,362) 1;A:34;LEUC 1;A:44;GLN:N 1;A:34;GLN:CA 1;A:44;GLN:C 9 120.41	(, ,				1:A:148:ARG:N		
	(' /	1:A:43:LEU:C					
(1,222 1:A:12;LYS:CB	(, ,						
(1,489)	(' /						
(1,664 1:A:154:MET:CA	(' /						
(1,315) 1:A:42:ILE:C	· · /						
(1,315) 1:A:42:LE:C	(, ,						
(1,220) 1:A:12:LYS:N 1:A:12:LYS:CA 1:A:12:LYS:CB 1:A:12:LYS:CG 1 120.19 (1,623) 1:A:142:THR:C 1:A:143:ALA:N 1:A:143:ALA:CA 1:A:145:ALB:CA 1:A:145:ALB:CC 1:A:155:ALB:CC 1:A:155:ALB:	· · /						
(1,623) 1:A:142:THR:C 1:A:143:ALA:N 1:A:143:ALA:CA 1:A:143:ALA:C 10 120.17 (1,519) 1:A:109:ILE:CA 1:A:109:ILE:CB 1:A:109:ILE:CG1 1:A:109:ILE:CD1 12 120.17 (1,398) 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:CB 1:A:68:THR:CG1 15 120.16 (1,427) 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:C 3 120.13 (1,667) 1:A:147:LEU:N 1:A:155:LEU:N 1:A:155:LEU:CA 1:A:155:LEU:C 14 120.11 (1,641) 1:A:147:LEU:N 1:A:147:LEU:CA 1:A:147:LEU:C 5 120.02 (1,503) 1:A:146:LEU:N 1:A:147:LEU:CA 1:A:147:LEU:C 5 120.02 (1,530) 1:A:146:LEU:C 1:A:147:LEU:CA 1:A:147:LEU:C 1 119.98 (1,340) 1:A:146:LEU:C 1:A:147:LEU:CA 1:A:147:LEU:C 3 119.98 (1,353) 1:A:16:LEU:N 1:A:16:LEU:C 1:A:147:LEU:CA 1:A:147:LEU:C 3 119.99 (1,452) 1:A:36:MET:CA <td< td=""><td>· · /</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></td<>	· · /						
1.3.109:ILE:CA	· · /						
(1,398) 1:A:68:THR:N	· · /						
(1,427) 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:C 3 120.13 (1,667) 1:A:154:MET:C 1:A:155:LEU:N 1:A:155:LEU:CA 1:A:155:LEU:C 14 120.11 (1,641) 1:A:147:LEU:N 1:A:147:LEU:CA 1:A:147:LEU:CG 5 120.02 (1,503) 1:A:165:PRO:N 1:A:165:PRO:CA 1:A:147:LEU:CB	/						
(1,667) 1:A:154:MET:C 1:A:155:LEU:N 1:A:155:LEU:CA 1:A:155:LEU:C 14 120.11 (1,641) 1:A:147:LEU:N 1:A:147:LEU:CA 1:A:147:LEU:CB 1:A:147:LEU:CG 5 120.02 (1,503) 1:A:105:PRO:N 1:A:105:PRO:CA 1:A:147:LEU:CB 1:A:140:LEU:CN 2 119.98 (1,340) 1:A:46:LEU:C 1:A:47:ALA:N 1:A:47:ALA:CA 1:A:47:ALA:C 19 119.98 (1,639) 1:A:146:LEU:CA 1:A:147:LEU:CA 1:A:147:LEU:C 3 119.9 (1,537) 1:A:64:MET:CA 1:A:64:MET:CB 1:A:64:MET:CG 1:A:16:LEU:CG 2 119.89 (1,541) 1:A:118:LYS:CA 1:A:118:LYS:CB 1:A:118:LYS:CD 12 119.86 (1,452) 1:A:85:GLY:C 1:A:86:ARG:N 1:A:86:ARG:CA 1:A:154:MET:SD 1 119.86 (1,664) 1:A:155:LEU:C 1:A:154:MET:CB 1:A:154:MET:CG 1:A:154:MET:SD 1 119.86 (1,675) 1:A:155:LEU:C 1:A:156:HIS:N 1:A:156:HIS:N 1:A:155:HEU:C 1:A:156:HIS:C							
(1,641) 1:A:147;LEU;N 1:A:147;LEU;CA 1:A:147;LEU;CB 1:A:147;LEU;CG 5 120.02 (1,530) 1:A:105;PRO;N 1:A:105;PRO;CA 1:A:105;PRO;C 1:A:147;LEU;C 1:A:147;LEU;C 1:A:147;LEU;C 1:A:147;LEU;C 1:A:147;LEU;C 3 119.98 (1,639) 1:A:146;GLN;C 1:A:147;LEU;D 1:A:147;LEU;CA 1:A:147;LEU;C 3 119.98 (1,537) 1:A:64;MET;CA 1:A:164;MET;CB 1:A:164;MET;CG 1:A:164;MET;SD 4 119.89 (1,533) 1:A:116;LEU;N 1:A:161;LEU;CA 1:A:161;LEU;CG 2 119.87 (1,541) 1:A:118;LYS;CA 1:A:118;LYS;CB 1:A:118;LYS;CD 1 119.89 (1,542) 1:A:35;GLY;C 1:A:36;ARG;N 1:A:36;ARG;CA 1:A:16;LEU;CB 1:A:118;LYS;CD 12 119.86 (1,642) 1:A:35;MET;CA 1:A:156;HIS;N 1:A:156;HIS;CA 1:A:156;HIS;CB 1 119.85 (1,647) 1:A:42;LE;CA 1:A:42;LE;CB 1:A:42;LE;CG1 12 119.65 (1,540) 1:A:146;GLY;N	, ,						
(1,503) 1:A:105:PRO:N 1:A:105:PRO:CA 1:A:105:PRO:C 1:A:106:TYR:N 2 119.98 (1,340) 1:A:46:LEU:C 1:A:47:ALA:N 1:A:47:ALA:CA 1:A:47:ALA:C 19 119.98 (1,639) 1:A:146:GLN:C 1:A:147:LEU:N 1:A:147:LEU:CA 1:A:147:LEU:C 3 119.99 (1,387) 1:A:46:MET:CA 1:A:64:MET:CB 1:A:64:MET:CG 1:A:46:MET:SD 4 119.89 (1,533) 1:A:116:LEU:N 1:A:116:LEU:CB 1:A:116:LEU:CG 2 119.87 (1,541) 1:A:18:LYS:CA 1:A:118:LYS:CB 1:A:118:LYS:CG 1:A:118:LYS:CD 12 119.86 (1,452) 1:A:85:GLY:C 1:A:86:ARG:N 1:A:86:ARG:CA 1:A:18:LYS:CD 12 119.86 (1,675) 1:A:15:LEU:C 1:A:15:HB:SN 1:A:15:HB:CS 1 119.85 (1,675) 1:A:15:LEU:C 1:A:17:8:GLU:N 1:A:15:HB:CS 1 119.74 (1,427) 1:A:73:TVAL:C 1:A:18:GLU:N 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CB 1:A:15:HB:C 1 119.65 <td>· · /</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>	· · /						
(1,340) 1:A:46:LEU:C 1:A:47:ALA:N 1:A:47:ALA:CA 1:A:47:ALA:C 19 119.98 (1,639) 1:A:146:GLN:C 1:A:147:LEU:N 1:A:147:LEU:CA 1:A:147:LEU:C 3 119.9 (1,639) 1:A:146:GLN:C 1:A:147:LEU:N 1:A:147:LEU:CA 1:A:147:LEU:CB 1:A:147:LEU:CB 3 119.9 (1,533) 1:A:116:LEU:N 1:A:116:LEU:CA 1:A:116:LEU:CB 1:A:116:LEU:CG 2 119.87 (1,541) 1:A:118:LYS:CA 1:A:118:LYS:CB 1:A:118:LYS:CD 12 119.86 (1,452) 1:A:355:GLY:C 1:A:18:A:86:ARG:CA 1:A:18:LYS:CD 12 119.86 (1,664) 1:A:154:MET:CA 1:A:154:MET:CB 1:A:154:MET:CG 1:A:156:HIS:CD 1 119.85 (1,675) 1:A:155:LEU:C 1:A:156:HIS:N 1:A:156:HIS:CA 1:A:156:HIS:C 11 119.74 (1,310) 1:A:42:ILE:N 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:148:ILE:CG 1:A:148:ILE:CG 1:A:148:ILE:CG 1:A:148:ILE:CG 1:A:148:ILE:CG 1:A:19:64 1:A:156:HIS:CB 1:A:156:HIS	· · /						
(1,639) 1:A:146:GLN:C 1:A:147:LEU:N 1:A:147:LEU:CA 1:A:147:LEU:C 3 119.9 (1,387) 1:A:64:MET:CA 1:A:64:MET:CB 1:A:64:MET:CG 1:A:64:MET:SD 4 119.89 (1,533) 1:A:116:LEU:N 1:A:116:LEU:CA 1:A:116:LEU:CB 1:A:116:LEU:CG 2 119.87 (1,541) 1:A:118:LYS:CA 1:A:118:LYS:CB 1:A:118:LYS:CD 12 119.86 (1,452) 1:A:355:GLY:C 1:A:154:MET:CB 1:A:154:MET:CG 1:A:154:MET:SD 1 119.86 (1,664) 1:A:154:MET:CA 1:A:154:MET:CB 1:A:154:MET:CG 1:A:156:HIS:C 5 119.86 (1,675) 1:A:155:LEU:C 1:A:156:HIS:N 1:A:156:HIS:CA 1:A:156:HIS:C 11 119.74 (1,427) 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:156:HIS:C 12 119.65 (1,500) 1:A:104:GLY:N 1:A:104:GLY:CA 1:A:104:GLY:CA 1:A:104:GLY:CA 1:A:105:PRO:N 12 119.64 (1,500) 1:A:148:ARG:CB 1:A:148:ARG:CB 1:A:148:ARG:CB <td>· · /</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>	· · /						
(1,387) 1:A:64:MET:CA 1:A:64:MET:CB 1:A:64:MET:CG 1:A:44:MET:SD 4 119.89 (1,533) 1:A:116:LEU:N 1:A:116:LEU:CA 1:A:116:LEU:CB 1:A:116:LEU:CG 2 119.87 (1,541) 1:A:118:LYS:CA 1:A:118:LYS:CB 1:A:118:LYS:CG 1:A:118:LYS:CD 12 119.86 (1,642) 1:A:85:GLY:C 1:A:86:ARG:N 1:A:86:ARG:CA 1:A:86:ARG:C 5 119.86 (1,664) 1:A:154:MET:CA 1:A:154:MET:CB 1:A:154:MET:CG 1:A:154:MET:SD 1 119.85 (1,675) 1:A:155:LEU:C 1:A:156:HIS:N 1:A:156:HIS:CA 1:A:156:HIS:CA 1:A:156:HIS:CA 1:A:142:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 12 119.65 (1,500) 1:A:104:GLY:N 1:A:156:HIS:CA 1:A:156:HIS:CB 1:A:156:HIS:CB 1:A:156:HIS:CB 1:A:156:HIS:CG 7 119.57 (1,442) 1:A:82:GLU:N 1:A:82:GLU:CA 1:A:82:GLU:CB 1:A:256:HIS:CG 7 119.56 (1,647) 1:A:148:ARG:CA 1:A:148:ARG:CB 1:A:148:ARG:CB 1:A:148:ARG:CB 1:A:156	(, ,						
(1,533) 1:A:116:LEU:N 1:A:116:LEU:CA 1:A:116:LEU:CB 1:A:116:LEU:CG 2 119.87 (1,541) 1:A:118:LYS:CA 1:A:118:LYS:CB 1:A:118:LYS:CG 1:A:118:LYS:CD 12 119.86 (1,452) 1:A:85:GLY:C 1:A:86:ARG:N 1:A:86:ARG:CA 1:A:186:ARG:C 5 119.86 (1,654) 1:A:154:MET:CA 1:A:154:MET:CB 1:A:154:MET:CG 1:A:154:MET:SD 1 119.85 (1,675) 1:A:155:LEU:C 1:A:156:HIS:N 1:A:156:HIS:CA 1:A:156:HIS:C 11 119.74 (1,427) 1:A:77:VAL:C 1:A:156:HIS:N 1:A:78:GLU:C 20 119.74 (1,310) 1:A:42:ILE:N 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 12 119.65 (1,500) 1:A:104:GLY:N 1:A:104:GLY:C 1:A:105:PRO:N 12 119.64 (1,676) 1:A:156:HIS:N 1:A:156:HIS:CA 1:A:156:HIS:CB 1:A:156:HIS:CG 7 119.57 (1,442) 1:A:82:GLU:N 1:A:82:GLU:CB 1:A:148:ARG:CD 17 119.51	(' /						
(1,541) 1:A:118:LYS:CA 1:A:118:LYS:CB 1:A:118:LYS:CG 1:A:118:LYS:CD 12 119.86 (1,452) 1:A:85:GLY:C 1:A:86:ARG:N 1:A:86:ARG:CA 1:A:86:ARG:C 5 119.86 (1,664) 1:A:154:MET:CA 1:A:154:MET:CB 1:A:154:MET:CG 1:A:154:MET:SD 1 119.85 (1,675) 1:A:155:LEU:C 1:A:156:HIS:N 1:A:156:HIS:CA 1:A:156:HIS:C 11 119.74 (1,427) 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:C 20 119.74 (1,310) 1:A:42:ILE:N 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 12 119.65 (1,500) 1:A:104:GLY:N 1:A:104:GLY:CA 1:A:105:PRO:N 12 119.64 (1,676) 1:A:156:HIS:N 1:A:156:HIS:CB 1:A:156:HIS:CG 7 119.57 (1,442) 1:A:282:GLU:N 1:A:82:GLU:CA 1:A:482:GLU:CB 1:A:482:GLU:CG 2 119.56 (1,647) 1:A:148:ARG:CA 1:A:148:ARG:CB 1:A:482:GLU:CB 1:A:482:GLU:CG 2 1	(, ,						
(1,452) 1:A:85:GLY:C 1:A:86:ARG:N 1:A:86:ARG:CA 1:A:86:ARG:C 5 119.86 (1,664) 1:A:154:MET:CA 1:A:154:MET:CB 1:A:154:MET:CG 1:A:154:MET:SD 1 119.85 (1,675) 1:A:155:LEU:C 1:A:156:HIS:N 1:A:156:HIS:CA 1:A:156:HIS:C 11 119.74 (1,427) 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:C 20 119.74 (1,310) 1:A:42:ILE:N 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 12 119.65 (1,500) 1:A:104:GLY:N 1:A:104:GLY:CA 1:A:104:GLY:CA 1:A:105:PRO:N 12 119.65 (1,676) 1:A:16:HIS:N 1:A:156:HIS:CA 1:A:156:HIS:CB 1:A:156:HIS:CG 7 119.57 (1,442) 1:A:82:GLU:N 1:A:25:GHIS:CA 1:A:48:ARG:CB 1:A:48:ARG:CB 1:A:148:ARG:CD 17 119.57 (1,442) 1:A:35:PHE:N 1:A:35:PHE:CA 1:A:148:ARG:CG 1:A:148:ARG:CD 17 119.51 (1,289) 1:A:35:PHE:N 1:A:35:PHE:CA	(, ,					12	
(1,664) 1:A:154:MET:CA 1:A:154:MET:CB 1:A:154:MET:CG 1:A:154:MET:SD 1 119.85 (1,675) 1:A:155:LEU:C 1:A:156:HIS:N 1:A:156:HIS:CA 1:A:156:HIS:C 11 119.74 (1,427) 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:C 20 119.74 (1,310) 1:A:42:ILE:N 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 12 119.65 (1,500) 1:A:104:GLY:N 1:A:104:GLY:CA 1:A:104:GLY:C 1:A:105:PRO:N 12 119.64 (1,676) 1:A:156:HIS:N 1:A:156:HIS:CA 1:A:156:HIS:CB 1:A:156:HIS:CG 7 119.57 (1,442) 1:A:82:GLU:N 1:A:82:GLU:CA 1:A:48:ARG:CB 1:A:148:ARG:CB 1:A:48:ARG:CB 1:A:148:ARG:CB	(' /						
(1,675) 1:A:155:LEU:C 1:A:156:HIS:N 1:A:156:HIS:CA 1:A:156:HIS:C 11 119.74 (1,427) 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:C 20 119.74 (1,310) 1:A:42:ILE:N 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 12 119.65 (1,500) 1:A:104:GLY:N 1:A:104:GLY:CA 1:A:104:GLY:C 1:A:105:PRO:N 12 119.64 (1,676) 1:A:156:HIS:N 1:A:156:HIS:CA 1:A:156:HIS:CB 1:A:156:HIS:CG 7 119.57 (1,442) 1:A:82:GLU:N 1:A:82:GLU:CA 1:A:82:GLU:CB 1:A:182:GLU:CG 2 119.56 (1,647) 1:A:148:ARG:CA 1:A:148:ARG:CB 1:A:148:ARG:CG 17 119.51 (1,289) 1:A:35:PHE:N 1:A:35:PHE:CA 1:A:35:PHE:CB 1:A:35:PHE:CG 2 119.46 (1,427) 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:18:LYS:CD 10 119.41 (1,541) 1:A:18:LYS:CA 1:A:118:LYS:CB 1:A:118:LYS:CD 1:A:119:49	· · /	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	1:A:154:MET:SD	1	
(1,427) 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:C 20 119.74 (1,310) 1:A:42:ILE:N 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 12 119.65 (1,500) 1:A:104:GLY:N 1:A:104:GLY:CA 1:A:104:GLY:C 1:A:105:PRO:N 12 119.64 (1,676) 1:A:156:HIS:N 1:A:156:HIS:CA 1:A:156:HIS:CB 1:A:156:HIS:CG 7 119.57 (1,442) 1:A:82:GLU:N 1:A:82:GLU:CA 1:A:82:GLU:CB 1:A:48:ARG:CD 7 119.57 (1,442) 1:A:82:GLU:N 1:A:82:GLU:CA 1:A:48:ARG:CD 17 119.56 (1,647) 1:A:148:ARG:CA 1:A:148:ARG:CB 1:A:148:ARG:CD 17 119.51 (1,289) 1:A:35:PHE:N 1:A:35:PHE:CA 1:A:35:PHE:CB 1:A:35:PHE:CG 2 119.46 (1,427) 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:C 16 119.44 (1,541) 1:A:118:LYS:CA 1:A:118:LYS:CB 1:A:118:LYS:CD 10 119.41 <t< td=""><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td>11</td><td></td></t<>						11	
(1,310) 1:A:42:ILE:N 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 12 119.65 (1,500) 1:A:104:GLY:N 1:A:104:GLY:CA 1:A:104:GLY:C 1:A:105:PRO:N 12 119.64 (1,676) 1:A:156:HIS:N 1:A:156:HIS:CA 1:A:156:HIS:CB 1:A:156:HIS:CG 7 119.57 (1,442) 1:A:82:GLU:N 1:A:82:GLU:CA 1:A:82:GLU:CB 1:A:82:GLU:CG 2 119.56 (1,647) 1:A:148:ARG:CA 1:A:148:ARG:CB 1:A:148:ARG:CD 17 119.51 (1,289) 1:A:35:PHE:N 1:A:35:PHE:CA 1:A:35:PHE:CB 1:A:35:PHE:CG 2 119.46 (1,427) 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:C 16 119.44 (1,541) 1:A:118:LYS:CA 1:A:118:LYS:CB 1:A:118:LYS:CD 10 119.41 (1,661) 1:A:153:LEU:C 1:A:154:MET:N 1:A:154:MET:CA 1:A:165:PRO:C 1:A:106:TYR:N 10 119.36 (1,503) 1:A:105:PRO:N 1:A:105:PRO:C 1:A:106:TYR:N 13 119.3	· · /						
(1,500) 1:A:104:GLY:N 1:A:104:GLY:CA 1:A:104:GLY:C 1:A:105:PRO:N 12 119.64 (1,676) 1:A:156:HIS:N 1:A:156:HIS:CA 1:A:156:HIS:CB 1:A:156:HIS:CG 7 119.57 (1,442) 1:A:82:GLU:N 1:A:82:GLU:CA 1:A:82:GLU:CB 1:A:82:GLU:CG 2 119.56 (1,647) 1:A:148:ARG:CA 1:A:148:ARG:CB 1:A:148:ARG:CG 1:A:148:ARG:CD 17 119.51 (1,289) 1:A:35:PHE:N 1:A:35:PHE:CA 1:A:35:PHE:CB 1:A:35:PHE:CG 2 119.46 (1,427) 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:C 16 119.44 (1,541) 1:A:118:LYS:CA 1:A:118:LYS:CB 1:A:118:LYS:CG 1:A:118:LYS:CD 10 119.41 (1,661) 1:A:153:LEU:C 1:A:154:MET:N 1:A:154:MET:CA 1:A:154:MET:C 16 119.36 (1,503) 1:A:105:PRO:N 1:A:105:PRO:C 1:A:106:TYR:N 10 119.34 (1,503) 1:A:16-LEU:C 1:A:47:ALA:N 1:A:47:ALA:CA 1:A:47:ALA:C	· · /	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	12	
(1,676) 1:A:156:HIS:N 1:A:156:HIS:CA 1:A:156:HIS:CB 1:A:156:HIS:CG 7 119.57 (1,442) 1:A:82:GLU:N 1:A:82:GLU:CA 1:A:82:GLU:CB 1:A:82:GLU:CG 2 119.56 (1,647) 1:A:148:ARG:CA 1:A:148:ARG:CB 1:A:148:ARG:CG 1:A:148:ARG:CD 17 119.51 (1,289) 1:A:35:PHE:N 1:A:35:PHE:CA 1:A:35:PHE:CB 1:A:35:PHE:CG 2 119.46 (1,427) 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:C 16 119.44 (1,541) 1:A:118:LYS:CA 1:A:118:LYS:CB 1:A:118:LYS:CG 1:A:118:LYS:CD 10 119.41 (1,661) 1:A:153:LEU:C 1:A:154:MET:N 1:A:154:MET:CA 1:A:154:MET:C 16 119.36 (1,503) 1:A:105:PRO:N 1:A:105:PRO:CA 1:A:106:TYR:N 10 119.34 (1,503) 1:A:16:EU:C 1:A:47:ALA:N 1:A:47:ALA:CA 1:A:47:ALA:C 20 119.34 (1,340) 1:A:46:LEU:C 1:A:47:ALA:N 1:A:46:MET:CG 1:A:64:MET:SD <t< td=""><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></t<>							
(1,442) 1:A:82:GLU:N 1:A:82:GLU:CA 1:A:82:GLU:CB 1:A:82:GLU:CG 2 119.56 (1,647) 1:A:148:ARG:CA 1:A:148:ARG:CB 1:A:148:ARG:CG 1:A:148:ARG:CD 17 119.51 (1,289) 1:A:35:PHE:N 1:A:35:PHE:CA 1:A:35:PHE:CB 1:A:35:PHE:CG 2 119.46 (1,427) 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:C 16 119.44 (1,541) 1:A:118:LYS:CA 1:A:118:LYS:CB 1:A:118:LYS:CG 1:A:118:LYS:CD 10 119.41 (1,661) 1:A:153:LEU:C 1:A:154:MET:N 1:A:154:MET:CA 1:A:154:MET:C 16 119.36 (1,503) 1:A:105:PRO:N 1:A:105:PRO:CA 1:A:105:PRO:C 1:A:106:TYR:N 10 119.34 (1,503) 1:A:105:PRO:N 1:A:47:ALA:N 1:A:47:ALA:CA 1:A:406:TYR:N 13 119.34 (1,340) 1:A:46:LEU:C 1:A:47:ALA:N 1:A:47:ALA:CA 1:A:47:ALA:C 20 119.3 (1,387) 1:A:64:MET:CA 1:A:64:MET:CG 1:A:64:MET:SD <th< td=""><td>· · /</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></th<>	· · /						
(1,647) 1:A:148:ARG:CA 1:A:148:ARG:CB 1:A:148:ARG:CG 1:A:148:ARG:CD 17 119.51 (1,289) 1:A:35:PHE:N 1:A:35:PHE:CA 1:A:35:PHE:CB 1:A:35:PHE:CG 2 119.46 (1,427) 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:C 16 119.44 (1,541) 1:A:118:LYS:CA 1:A:118:LYS:CB 1:A:118:LYS:CG 1:A:118:LYS:CD 10 119.41 (1,661) 1:A:153:LEU:C 1:A:154:MET:N 1:A:154:MET:CA 1:A:154:MET:C 16 119.36 (1,503) 1:A:105:PRO:N 1:A:105:PRO:CA 1:A:105:PRO:C 1:A:106:TYR:N 10 119.34 (1,503) 1:A:105:PRO:N 1:A:105:PRO:CA 1:A:105:PRO:C 1:A:106:TYR:N 13 119.34 (1,503) 1:A:46:LEU:C 1:A:47:ALA:N 1:A:47:ALA:CA 1:A:47:ALA:C 20 119.34 (1,503) 1:A:46:MET:CA 1:A:47:ALA:C 20 119.3 119.34 (1,503) 1:A:46:MET:CA 1:A:47:ALA:C 20 119.3 (1,3	· · /						
(1,289) 1:A:35:PHE:N 1:A:35:PHE:CA 1:A:35:PHE:CB 1:A:35:PHE:CG 2 119.46 (1,427) 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:C 16 119.44 (1,541) 1:A:118:LYS:CA 1:A:118:LYS:CB 1:A:118:LYS:CG 1:A:118:LYS:CD 10 119.41 (1,661) 1:A:153:LEU:C 1:A:154:MET:N 1:A:154:MET:CA 1:A:154:MET:C 16 119.36 (1,503) 1:A:105:PRO:N 1:A:105:PRO:CA 1:A:105:PRO:C 1:A:106:TYR:N 10 119.34 (1,503) 1:A:105:PRO:N 1:A:105:PRO:CA 1:A:105:PRO:C 1:A:106:TYR:N 13 119.34 (1,304) 1:A:46:LEU:C 1:A:47:ALA:N 1:A:47:ALA:CA 1:A:47:ALA:C 20 119.3 (1,387) 1:A:64:MET:CA 1:A:64:MET:CB 1:A:64:MET:CB 1:A:64:MET:SD 13 119.26 (1,527) 1:A:113:TYR:N 1:A:113:TYR:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CB 1:A:46:ARG:C	(, ,						
(1,427) 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:C 16 119.44 (1,541) 1:A:118:LYS:CA 1:A:118:LYS:CB 1:A:118:LYS:CG 1:A:118:LYS:CD 10 119.41 (1,661) 1:A:153:LEU:C 1:A:154:MET:N 1:A:154:MET:CA 1:A:154:MET:C 16 119.36 (1,503) 1:A:105:PRO:N 1:A:105:PRO:CA 1:A:105:PRO:C 1:A:106:TYR:N 10 119.34 (1,503) 1:A:405:PRO:N 1:A:105:PRO:CA 1:A:105:PRO:C 1:A:106:TYR:N 13 119.34 (1,340) 1:A:46:LEU:C 1:A:47:ALA:N 1:A:47:ALA:CA 1:A:47:ALA:C 20 119.3 (1,387) 1:A:64:MET:CA 1:A:64:MET:CB 1:A:64:MET:CG 1:A:64:MET:SD 13 119.26 (1,527) 1:A:113:TYR:N 1:A:113:TYR:CA 1:A:113:TYR:CB 1:A:113:TYR:CG 12 119.23 (1,331) 1:A:45:LEU:CA 1:A:86:ARG:N 1:A:86:ARG:CA 1:A:86:ARG:C 8 119.19	· · /						
(1,541) 1:A:118:LYS:CA 1:A:118:LYS:CB 1:A:118:LYS:CG 1:A:118:LYS:CD 10 119.41 (1,661) 1:A:153:LEU:C 1:A:154:MET:N 1:A:154:MET:CA 1:A:154:MET:C 16 119.36 (1,503) 1:A:105:PRO:N 1:A:105:PRO:CA 1:A:105:PRO:C 1:A:106:TYR:N 10 119.34 (1,503) 1:A:105:PRO:N 1:A:105:PRO:CA 1:A:105:PRO:C 1:A:106:TYR:N 13 119.34 (1,340) 1:A:46:LEU:C 1:A:47:ALA:N 1:A:47:ALA:CA 1:A:47:ALA:C 20 119.3 (1,387) 1:A:64:MET:CA 1:A:64:MET:CB 1:A:64:MET:CB 1:A:64:MET:SD 13 119.26 (1,527) 1:A:113:TYR:N 1:A:113:TYR:CA 1:A:113:TYR:CB 1:A:113:TYR:CG 12 119.23 (1,331) 1:A:45:LEU:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CG 1:A:45:LEU:CD1 12 119.21 (1,452) 1:A:86:ARG:N 1:A:86:ARG:CA 1:A:86:ARG:C 8 119.19	, ,						
(1,661) 1:A:153:LEU:C 1:A:154:MET:N 1:A:154:MET:CA 1:A:154:MET:C 16 119.36 (1,503) 1:A:105:PRO:N 1:A:105:PRO:CA 1:A:105:PRO:C 1:A:106:TYR:N 10 119.34 (1,503) 1:A:105:PRO:N 1:A:105:PRO:CA 1:A:105:PRO:C 1:A:106:TYR:N 13 119.34 (1,340) 1:A:46:LEU:C 1:A:47:ALA:N 1:A:47:ALA:CA 1:A:47:ALA:C 20 119.3 (1,387) 1:A:64:MET:CA 1:A:64:MET:CB 1:A:64:MET:CG 1:A:64:MET:SD 13 119.26 (1,527) 1:A:113:TYR:N 1:A:113:TYR:CA 1:A:113:TYR:CB 1:A:113:TYR:CG 12 119.23 (1,331) 1:A:45:LEU:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CG 1:A:45:LEU:CD1 12 119.21 (1,452) 1:A:86:ARG:N 1:A:86:ARG:CA 1:A:86:ARG:C 8 119.19							
(1,503) 1:A:105:PRO:N 1:A:105:PRO:CA 1:A:105:PRO:C 1:A:106:TYR:N 10 119.34 (1,503) 1:A:105:PRO:N 1:A:105:PRO:CA 1:A:105:PRO:C 1:A:106:TYR:N 13 119.34 (1,340) 1:A:46:LEU:C 1:A:47:ALA:N 1:A:47:ALA:CA 1:A:47:ALA:C 20 119.3 (1,387) 1:A:64:MET:CA 1:A:64:MET:CB 1:A:64:MET:CG 1:A:64:MET:SD 13 119.26 (1,527) 1:A:113:TYR:N 1:A:113:TYR:CA 1:A:113:TYR:CB 1:A:113:TYR:CG 12 119.23 (1,331) 1:A:45:LEU:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CG 1:A:45:LEU:CD1 12 119.21 (1,452) 1:A:85:GLY:C 1:A:86:ARG:N 1:A:86:ARG:CA 1:A:86:ARG:C 8 119.19	(, ,						
(1,503) 1:A:105:PRO:N 1:A:105:PRO:CA 1:A:105:PRO:C 1:A:106:TYR:N 13 119.34 (1,340) 1:A:46:LEU:C 1:A:47:ALA:N 1:A:47:ALA:CA 1:A:47:ALA:C 20 119.3 (1,387) 1:A:64:MET:CA 1:A:64:MET:CB 1:A:64:MET:CG 1:A:64:MET:SD 13 119.26 (1,527) 1:A:113:TYR:N 1:A:113:TYR:CA 1:A:113:TYR:CB 1:A:113:TYR:CG 12 119.23 (1,331) 1:A:45:LEU:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CG 1:A:45:LEU:CD1 12 119.21 (1,452) 1:A:85:GLY:C 1:A:86:ARG:N 1:A:86:ARG:CA 1:A:86:ARG:C 8 119.19	· · /						
(1,340) 1:A:46:LEU:C 1:A:47:ALA:N 1:A:47:ALA:CA 1:A:47:ALA:C 20 119.3 (1,387) 1:A:64:MET:CA 1:A:64:MET:CB 1:A:64:MET:CG 1:A:64:MET:SD 13 119.26 (1,527) 1:A:113:TYR:N 1:A:113:TYR:CA 1:A:113:TYR:CB 1:A:113:TYR:CG 12 119.23 (1,331) 1:A:45:LEU:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CG 1:A:45:LEU:CD1 12 119.21 (1,452) 1:A:85:GLY:C 1:A:86:ARG:N 1:A:86:ARG:CA 1:A:86:ARG:C 8 119.19	,						
(1,387) 1:A:64:MET:CA 1:A:64:MET:CB 1:A:64:MET:CG 1:A:64:MET:SD 13 119.26 (1,527) 1:A:113:TYR:N 1:A:113:TYR:CA 1:A:113:TYR:CB 1:A:113:TYR:CG 12 119.23 (1,331) 1:A:45:LEU:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CG 1:A:45:LEU:CD1 12 119.21 (1,452) 1:A:85:GLY:C 1:A:86:ARG:N 1:A:86:ARG:CA 1:A:86:ARG:C 8 119.19							
(1,527) 1:A:113:TYR:N 1:A:113:TYR:CA 1:A:113:TYR:CB 1:A:113:TYR:CG 12 119.23 (1,331) 1:A:45:LEU:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CG 1:A:45:LEU:CD1 12 119.21 (1,452) 1:A:85:GLY:C 1:A:86:ARG:N 1:A:86:ARG:CA 1:A:86:ARG:C 8 119.19	,						
(1,331) 1:A:45:LEU:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CG 1:A:45:LEU:CD1 12 119.21 (1,452) 1:A:85:GLY:C 1:A:86:ARG:N 1:A:86:ARG:CA 1:A:86:ARG:C 8 119.19	· · /						
(1,452) 1:A:85:GLY:C 1:A:86:ARG:N 1:A:86:ARG:CA 1:A:86:ARG:C 8 119.19	· · /						
	· · /						
-(1,100) $+(1.0.010.010.0)$ $+(1.0.011.0)$ $+(1.0.011.0)$ $+(1.0.011.0)$ $+(1.0.011.0)$	(1,433)	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	1:A:79:GLY:CA	1:A:79:GLY:C	7	119.17



	ed from previous pag		A		3.6.1.1	371 1 11 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,427)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	12	119.16
(1,340)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	2	119.11
(1,198)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	10	119.11
(1,173)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	17	119.07
(1,658)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	17	119.06
(1,602)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	15	118.99
(1,555)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	16	118.98
(1,360)	1:A:54:SER:C	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	14	118.92
(1,328)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	14	118.92
(1,479)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	12	118.9
(1,466)	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	7	118.89
(1,234)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	11	118.89
(1,554)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	19	118.86
(1,685)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	4	118.82
(1,481)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	17	118.78
(1,322)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	1	118.77
(1,241)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	9	118.68
(1,264)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	19	118.67
(1,264)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	8	118.66
(1,340)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	8	118.63
(1,288)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	7	118.62
(1,344)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	17	118.58
(1,323)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	4	118.58
(1,322)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	18	118.57
(1,268)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	18	118.52
(1,209)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	3	118.52
(1,670)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	5	118.5
(1,496)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	20	118.36
(1,174)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	14	118.31
(1,499)	1:A:103:ILE:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	11	118.28
(1,663)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	13	118.21
(1,281)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	11	118.19
(1,679)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	11	118.15
(1,445)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	7	118.15
(1,318)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	17	118.09
(1,629)	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	14	118.01
(1,466)	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	20	118.0
(1,639)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	13	117.99
(1,433)	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	1:A:79:GLY:CA	1:A:79:GLY:C	14	117.98
(1,322)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	6	117.95
(1,657)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	12	117.94
(1,280)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	7	117.89
(1,307)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	11	117.86
(1,452)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	6	117.85
(1,300)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	18	117.84
(1,294)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	14	117.81
(1,234) $(1,586)$	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	8	117.77
(1,387)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	10	117.74
(1,322)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	19	117.73
(1,361)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	2	117.72
(1,647)	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	1:A:148:ARG:CD	5	117.72
(1,041)	1.11.140.AIIG.OA	1.11.140.AIIG.OD	1.11.140.AIG.OG	1.11.140.AIG.OD		111.1



	ed from previous pag		A		3.6.1.1	37.1 1
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,499)	1:A:103:ILE:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	18	117.7
(1,340)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	13	117.69
(1,447)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	10	117.68
(1,591)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	12	117.61
(1,427)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	6	117.58
(1,391)	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	9	117.58
(1,340)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	15	117.56
(1,172)	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	17	117.48
(1,661)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	2	117.47
(1,603)	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:CB	1:A:138:ASN:CG	16	117.47
(1,639)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	8	117.44
(1,328)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	8	117.43
(1,340)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	16	117.4
(1,391)	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	5	117.39
(1,568)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	15	117.34
(1,328)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	2	117.29
(1,582)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	8	117.25
(1,360)	1:A:54:SER:C	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	15	117.25
(1,252)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	19	117.25
(1,559)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	2	117.23
(1,445)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	13	117.14
(1,185)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	5	117.12
(1,509)	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	3	117.11
(1,243)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	7	117.1
(1,489)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	20	117.09
(1,361)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	13	117.08
(1,389)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	18	117.07
(1,328)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	18	117.03
(1,433)	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	1:A:79:GLY:CA	1:A:79:GLY:C	8	117.02
(1,639)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	6	117.01
(1,562)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	3	116.95
(1,275)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	5	116.93
(1,399)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	2	116.92
(1,478)	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	19	116.9
(1,262)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	1	116.9
(1,678)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1	116.86
(1,582)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	4	116.84
(1,324)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	15	116.82
(1,264)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	2	116.82
(1,526)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	20	116.77
(1,252)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	11	116.76
(1,391)	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	8	116.73
(1,427)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	4	116.71
(1,305)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	15	116.69
(1,399)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	17	116.63
(1,639)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	9	116.5
(1,427)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	8	116.5
(1,252)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	15	116.49
(1,463)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	20	116.46
(1,478)	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	10	116.41
(1,478)	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	20	116.29
(1,110)	1.11.04.0L16.0	1.71.55.011.11	1.11.00.GLT.OA	1.71.00.GET.C		od on nort nage



	ed from previous pag Atom-1	e Atom-2	Atom 2	Atom 1	Madal	Violetien (a)
Key			Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,172)	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	9	116.29
(1,199)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	11	116.26
(1,388)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	3	116.25
(1,174)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	18	116.24
(1,360)	1:A:54:SER:C	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	19	116.2
(1,452)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	16	116.16
(1,361)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	19	116.13
(1,667)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	2	116.12
(1,686)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	8	116.11
(1,572)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	1	116.06
(1,686)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	15	116.01
(1,340)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	5	115.98
(1,264)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	1	115.98
(1,322)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	7	115.88
(1,270)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	19	115.83
(1,639)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	5	115.71
(1,284)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	18	115.71
(1,340)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	14	115.7
(1,384)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	19	115.61
(1,242)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	4	115.59
(1,361)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	11	115.58
(1,555)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	10	115.57
(1,667)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	13	115.56
(1,463)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	18	115.55
(1,664)	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	1:A:154:MET:SD	6	115.44
(1,447)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	7	115.43
(1,340)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	12	115.35
(1,190)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	14	115.35
(1,665)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	4	115.29
(1,503)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	3	115.29
(1,586)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	15	115.12
(1,328)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	17	115.12
(1,293)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	3	115.12
(1,360)	1:A:54:SER:C	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	2	115.09
(1,433)	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	1:A:79:GLY:CA	1:A:79:GLY:C	16	114.97
(1,601)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	2	114.96
(1,328)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	16	114.96
(1,503)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	6	114.86
(1,466)	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	18	114.85
(1,241)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	19	114.74
(1,496)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	17	114.72
(1,515)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	2	114.7
(1,515)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	11	114.68
(1,289)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	4	114.64
(1,379)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	8	114.63
(1,496)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	9	114.62
(1,668)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	19	114.61
(1,340)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	18	114.6
(1,360)	1:A:54:SER:C	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	10	114.58
(1,306)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	15	114.55
(1,466)	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	8	114.54
(1,400)	1.A.03.1111.O	1.A.30.GL1.N	1.A.30.GL1.CA	1.A.30.GL1.C		114.04



Key	$egin{array}{c} ext{ed from previous pag} \ ext{ } ext{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,361)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	10	114.53
(1,303)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	14	114.48
(1,509)	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	14	114.43
(1,332)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	2	114.39
(1,179)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	11	114.36
(1,447)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	12	114.33
(1,602)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	8	114.29
(1,479)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	10	114.29
(1,186)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	20	114.29
(1,598)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	15	114.28
(1,384)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	15	114.28
(1,433)	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	1:A:79:GLY:CA	1:A:79:GLY:C	17	114.22
(1,361)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	1	114.22
(1,609)	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	1:A:140:ALA:CA	1:A:140:ALA:C	17	114.12
(1,652)	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	1:A:150:ARG:CD	15	114.03
(1,307)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	14	114.03
(1,590)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	11	114.01
(1,328)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	6	114.01
(1,328) $(1,307)$	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	7	114.01
(1,647)	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	1:A:148:ARG:CD	1	113.98
(1,328)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	1	113.95
(1,328) $(1,315)$	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	11	113.92
(1,313) $(1,498)$	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	6	113.9
(1,498) $(1,498)$	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	15	113.9
(1,498) $(1,404)$	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	16	113.89
(1,404) $(1,675)$	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	4	113.88
(1,073) $(1,478)$	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	8	113.88
(1,478) $(1,661)$	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	1	113.81
(1,001) $(1,495)$	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	16	113.74
(1,499) $(1,241)$	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	13	113.74
(1,241) $(1,623)$	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	15	113.63
(1,023) $(1,303)$	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	8	113.62
(1,303) $(1,463)$	1:A:40:1115.C 1:A:89:THR:N	1:A:41:A5F:N 1:A:89:THR:CA	1:A:41:ASF:CA 1:A:89:THR:CB	1:A:41:ASF:C 1:A:89:THR:OG1	17	113.59
` '	1:A:89:THR:N	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	4	113.55
(1,466)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:CA	1:A:56:PRO:N	18	
(1,361)		1:A:55:GLY:CA 1:A:47:ALA:N			3	113.5
(1,340)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N 1:A:158:SER:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C		113.45
(1,686)	1:A:157:GLU:C		1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C 1:A:29:SER:N	11	113.41
(1,268)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C		16	113.37 113.29
(1,391)	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C 1:A:143:ALA:CA	1:A:66:ALA:N 1:A:143:ALA:C	13	
(1,623)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N			18	113.28
(1,515)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	9	113.25
(1,467)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	19	113.25
(1,667)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	10	113.24
(1,340)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	7	113.2
(1,361)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	4	113.18
(1,602)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	6	113.17
(1,361)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	3	113.14
(1,612)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	11	113.13
(1,589)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	8	113.08
(1,685)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	12	112.97
(1,467)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	16	112.97



	ed from previous pag		A		3.5.1.1	T71 1 11 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,467)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	17	112.93
(1,392)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	5	112.87
(1,665)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	7	112.81
(1,639)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	11	112.81
(1,548)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	3	112.77
(1,392)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	13	112.74
(1,466)	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	16	112.73
(1,303)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	5	112.56
(1,447)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	1	112.54
(1,644)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	1:A:148:ARG:N	18	112.47
(1,354)	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	1:A:51:LYS:CD	6	112.46
(1,612)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	14	112.38
(1,345)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	16	112.3
(1,591)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	19	112.17
(1,246)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	17	112.16
(1,252)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	16	112.07
(1,361)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	12	112.06
(1,621)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1	112.04
(1,452)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	14	112.02
(1,509)	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	18	111.98
(1,452)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	9	111.95
(1,360)	1:A:54:SER:C	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	7	111.95
(1,509)	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	15	111.94
(1,665)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	10	111.86
(1,515)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	17	111.8
(1,503)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	14	111.75
(1,394)	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	12	111.75
(1,589)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	9	111.74
(1,273)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	11	111.74
(1,515)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	7	111.6
(1,322)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	16	111.56
(1,340)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	9	111.55
(1,388)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	17	111.5
(1,340)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	10	111.46
(1,340)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	1	111.43
(1,393)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	16	111.42
(1,635)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	3	111.36
(1,191)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	10	111.33
(1,169)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	13	111.33
(1,240)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	18	111.32
(1,664)	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	1:A:154:MET:SD	19	111.31
(1,192)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	15	111.31
(1,192)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	11	111.29
(1,187)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	6	111.27
(1,307)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	8	111.2
(1,320)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	6	111.19
(1,684)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	3	111.16
(1,328)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	5	111.15
(1,382)	1:A:62:PHE:C	1:A:63:GLY:N	1:A:63:GLY:CA	1:A:63:GLY:C	16	111.14
(1,592) $(1,598)$	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	20	111.06
(1,564)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	15	111.00
(1,004)	1.71.121.1110.0	1.71.120.0010.11	1.11.120.0L10.OA	1.71.120.0110.0		od on next nage



	ed from previous pag				7.5 1.1	T70 1 10 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,639)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	15	110.98
(1,389)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	7	110.98
(1,591)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	3	110.94
(1,360)	1:A:54:SER:C	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	13	110.89
(1,480)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	15	110.88
(1,548)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	18	110.85
(1,498)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	3	110.78
(1,668)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	18	110.66
(1,190)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	4	110.66
(1,667)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	3	110.6
(1,511)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	1	110.6
(1,515)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	15	110.55
(1,209)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	5	110.55
(1,433)	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	1:A:79:GLY:CA	1:A:79:GLY:C	15	110.54
(1,270)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	17	110.54
(1,644)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	1:A:148:ARG:N	19	110.5
(1,328)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	7	110.49
(1,532)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	7	110.43
(1,602)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	5	110.38
(1,185)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	2	110.38
(1,445)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	4	110.34
(1,623)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	2	110.32
(1,678)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	16	110.3
(1,447)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	13	110.29
(1,431)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	11	110.29
(1,602)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	20	110.28
(1,328)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	11	110.27
(1,264)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	6	110.27
(1,322)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	17	110.26
(1,358)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	6	110.21
(1,602)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	16	110.18
(1,395)	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	14	110.17
(1,174)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	9	110.15
(1,661)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	10	110.13
(1,328)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	15	110.12
(1,270)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	11	110.1
(1,684)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	15	110.08
(1,322)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	3	110.08
(1,382)	1:A:62:PHE:C	1:A:63:GLY:N	1:A:63:GLY:CA	1:A:63:GLY:C	4	110.06
(1,221)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	13	110.06
(1,345)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	3	110.03
(1,665)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	13	109.99
(1,617)	1:A:141:GLU:C	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	12	109.91
(1,331)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	6	109.82
(1,684)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	19	109.76
(1,498)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	5	109.74
(1,264)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	4	109.67
(1,303)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	9	109.66
(1,179)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1	109.65
(1,644)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	1:A:148:ARG:N	11	109.6
(1,584)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	15	109.6



	ed from previous pag		A 4 9	A 4 4	N/L - 1 - 1	17: -1-4: (-)
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,639)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	18	109.57
(1,328)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	4	109.55
(1,331)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	19	109.51
(1,589)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	3	109.5
(1,252)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	10	109.5
(1,345)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	14	109.49
(1,661)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	7	109.47
(1,468)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	18	109.47
(1,675)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	18	109.46
(1,506)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	12	109.45
(1,466)	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	10	109.36
(1,661)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	4	109.34
(1,673)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	12	109.31
(1,582)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	13	109.28
(1,268)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	14	109.28
(1,211)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	6	109.24
(1,621)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	17	109.18
(1,471)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	10	109.09
(1,564)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	2	109.04
(1,174)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	20	109.03
(1,390)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	3	109.0
(1,453)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	8	108.98
(1,174)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	11	108.97
(1,389)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	4	108.95
(1,452)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	4	108.91
(1,388)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	14	108.9
(1,433)	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	1:A:79:GLY:CA	1:A:79:GLY:C	9	108.89
(1,280)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	1	108.83
(1,187)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	12	108.8
(1,499)	1:A:103:ILE:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	19	108.76
(1,315)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	8	108.71
(1,680)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	8	108.69
(1,280)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	12	108.55
(1,373)	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	1:A:60:ARG:CD	3	108.5
(1,358)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	10	108.47
(1,315)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	17	108.45
(1,447)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	2	108.44
(1,589)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	4	108.42
(1,391)	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	15	108.35
(1,548)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	16	108.29
(1,264)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	12	108.29
(1,431)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	7	108.27
(1,468)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	10	108.2
(1,460) $(1,252)$	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	18	108.15
(1,232) $(1,449)$	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	5	108.12
(1,345) $(1,345)$	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	18	108.12
(1,345) $(1,345)$	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA 1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	2	107.93
(1,343) $(1,439)$	1:A:81:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	13	107.86
(1,439) $(1,673)$	1:A:01:VAL:C 1:A:155:LEU:N	1:A:02:GLU:N 1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	18	107.85
(1,073) $(1,297)$	1:A:39:TYR:N	1:A:195:LEU:CA 1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	14	107.83
(1,297) $(1,361)$	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	20	107.78
(1,301)	1:A:00:GL1:IN	1:A:00:GLY:CA	1:A:55:GLY:U	1:A:00:FKU:N		107.78



Key	$egin{array}{c} ext{ed from previous pag} \ ext{ } ext{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,650)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	11	107.77
(1,384)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	12	107.77
(1,511)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	14	107.68
(1,479)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	3	107.67
(1,384)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	5	107.66
(1,452)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	11	107.64
(1,548)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	7	107.59
(1,441)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	10	107.58
(1,389)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	14	107.57
(1,187)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	19	107.55
(1,643)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	2	107.43
(1,361)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	15	107.42
(1,564)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	11	107.4
(1,466)	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	5	107.37
(1,602)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	13	107.36
(1,447)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	9	107.33
(1,500)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	6	107.32
(1,384)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	16	107.32
(1,322)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	12	107.32
(1,629)	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	1	107.27
(1,612)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	4	107.27
(1,305)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1	107.27
(1,199)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	12	107.25
(1,199) $(1,463)$	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	1	107.24
(1,403) $(1,589)$	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	20	107.23
(1,369) $(1,449)$	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	9	107.16
(1,306)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	2	107.12
(1,313)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	7	107.12
(1,313) $(1,170)$	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	4	107.11
(1,170) $(1,452)$	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	2	107.04
(1,462) $(1,466)$	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1	107.02
(1,360)	1:A:54:SER:C	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	8	106.98
(1,173)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	15	106.95
(1,173) $(1,209)$	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	16	106.94
(1,209) $(1,466)$	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLV:CA	1:A:90:GLY:C	6	106.87
(1,400) $(1,661)$	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	9	106.83
(1,001) $(1,452)$	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	12	106.82
(1,432) $(1,328)$	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	3	106.82
(1,328) $(1,447)$	1:A:44:GLN:C 1:A:83:GLY:C	1:A:45:LEU:N 1:A:84:SER:N	1:A:45:LEU:CA 1:A:84:SER:CA	1:A:45:LEU:C 1:A:84:SER:C	17	106.73
(1,447) $(1,293)$	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	18	106.73
(1,293) $(1,209)$	1:A:9:CYS:C	1:A:30:GLU:CA 1:A:10:GLU:N	1:A:30:GLU:CB 1:A:10:GLU:CA	1:A:30:GLU:CG	9	106.71
(1,209) $(1,427)$	1:A:9:C 15:C 1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	17	106.7
(1,427) $(1,542)$	1:A:119:TRP:N	1:A:78:GLU:N 1:A:119:TRP:CA	1:A:78:GLU:CA 1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	14	106.66
· · /	1:A:119:1 RP:N 1:A:72:GLU:N	1:A:119:1RP:CA 1:A:72:GLU:CA	1:A:119:1RP:CB 1:A:72:GLU:C	1:A:119:1RP:CG 1:A:73:PHE:N		106.63
(1,413) $(1,449)$	1:A:72:GLU:N 1:A:84:SER:N	1:A:72:GLU:CA 1:A:84:SER:CA	1:A:72:GLU:C 1:A:84:SER:C	1:A:73:PHE:N 1:A:85:GLY:N	11 19	106.58
· · /	1:A:54:5ER:N 1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	5	106.57
(1,190) (1,389)	1:A:64:MET:C	1:A:5:CYS:CA 1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	13	106.51
` '	1:A:78:GLU:N	1:A:05:SER:N 1:A:78:GLU:CA	1:A:05:SER:CA 1:A:78:GLU:C	1:A:05:SER:C 1:A:79:GLY:N		106.43
(1,431)					19	
(1,623)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	11	106.42
(1,596)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	2	106.39
(1,452)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	3	106.37



Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,220)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	4	106.34
(1,168)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1	106.34
(1,300)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	12	106.32
(1,413)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:PHE:N	15	106.31
(1,395)	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	20	106.28
(1,392)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	1	106.28
(1,591)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	20	106.22
(1,679)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	18	106.2
(1,500)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	3	106.17
(1,593)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	6	106.15
(1,667)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	20	106.08
(1,390)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	19	106.08
(1,431)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	16	106.05
(1,511)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	10	106.03
(1,382)	1:A:62:PHE:C	1:A:63:GLY:N	1:A:63:GLY:CA	1:A:63:GLY:C	13	105.97
(1,393)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	12	105.96
(1,515)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	3	105.92
(1,686)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	17	105.91
(1,564)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	8	105.91
(1,480)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	19	105.89
(1,686)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	6	105.81
(1,452)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	15	105.79
(1,413)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:PHE:N	7	105.76
(1,173)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	13	105.74
(1,361)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	5	105.73
(1,679)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	5	105.71
(1,480)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	7	105.69
(1,345)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	11	105.68
(1,620)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	4	105.64
(1,612)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	20	105.58
(1,639)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	19	105.57
(1,320)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	2	105.53
(1,540)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	5	105.44
(1,174)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	7	105.43
(1,232)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	16	105.4
(1,644)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	1:A:148:ARG:N	5	105.37
(1,209)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	7	105.35
(1,382)	1:A:62:PHE:C	1:A:63:GLY:N	1:A:63:GLY:CA	1:A:63:GLY:C	8	105.34
(1,667)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	4	105.33
(1,427)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	2	105.32
(1,639)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	14	105.31
(1,500)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	18	105.31
(1,509)	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	10	105.29
(1,498)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	7	105.29
(1,358)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	19	105.14
(1,572)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	17	105.12
(1,360)	1:A:54:SER:C	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	16	105.1
(1,629)	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	9	105.09
(1,345)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	7	105.09
(1,539)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	4	105.06
(1,548)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	19	104.99



	ed from previous pag		A		3.6.1.1	37.1 1
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,467)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	1	104.94
(1,673)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	3	104.87
(1,449)	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	6	104.87
(1,591)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	14	104.85
(1,384)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	18	104.74
(1,209)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	15	104.7
(1,199)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	13	104.66
(1,503)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	16	104.58
(1,644)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	1:A:148:ARG:N	10	104.57
(1,509)	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	8	104.55
(1,439)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	11	104.53
(1,345)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	5	104.48
(1,602)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	12	104.47
(1,446)	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	1:A:83:GLY:CA	1:A:83:GLY:C	13	104.43
(1,481)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	15	104.4
(1,555)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	8	104.35
(1,187)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	18	104.34
(1,548)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	1	104.33
(1,548)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	12	104.33
(1,548)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	6	104.26
(1,503)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	4	104.24
(1,360)	1:A:54:SER:C	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	9	104.21
(1,191)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	1	104.21
(1,584)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	19	104.2
(1,511)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	20	104.2
(1,589)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	19	104.18
(1,478)	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	5	104.15
(1,313)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	9	104.15
(1,190)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	9	104.09
(1,639)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	1	104.03
(1,180)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	12	103.99
(1,361)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	8	103.98
(1,199)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	20	103.96
(1,612)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	15	103.95
(1,621)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	3	103.94
(1,303)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	6	103.92
(1,592)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	6	103.85
(1,185)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	4	103.84
(1,273)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	5	103.76
(1,639)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	10	103.72
(1,199)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	7	103.64
(1,686)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	5	103.59
(1,623)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	19	103.46
(1,612)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	1	103.46
(1,450)	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	1:A:85:GLY:CA	1:A:85:GLY:C	3	103.42
(1,431)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	17	103.39
(1,303)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	10	103.38
(1,621)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	9	103.37
(1,398)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	12	103.36
(1,338) $(1,478)$	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	3	103.32
(1,478) $(1,623)$	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	14	103.27
(1,020)	1.11.142.1111(.0	1.71.140.71171.11	1.11.140.11L11.OA	1.11.140.11111.0		103.21



	ed from previous pag		A		36 11	T71 1
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,661)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	13	103.23
(1,186)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	9	103.2
(1,433)	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	1:A:79:GLY:CA	1:A:79:GLY:C	19	103.18
(1,392)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	7	103.18
(1,548)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	8	103.17
(1,675)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	13	103.16
(1,293)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	8	103.16
(1,686)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	3	103.11
(1,452)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	10	103.11
(1,548)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	9	103.08
(1,272)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	4	103.07
(1,601)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	3	103.04
(1,686)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	10	102.99
(1,292)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	17	102.95
(1,468)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	14	102.83
(1,672)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	16	102.8
(1,639)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	20	102.77
(1,564)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	13	102.75
(1,511)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	15	102.72
(1,269)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	6	102.72
(1,358)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1	102.65
(1,388)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	2	102.61
(1,667)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	6	102.59
(1,591)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	8	102.57
(1,395)	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	17	102.54
(1,307)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	10	102.47
(1,303)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	7	102.44
(1,384)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	7	102.41
(1,511)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	11	102.4
(1,612)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	10	102.17
(1,361)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	16	102.16
(1,679)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	10	102.13
(1,622)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	6	102.12
(1,684)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	8	102.06
(1,391)	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	7	102.06
(1,644)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	1:A:148:ARG:N	2	101.91
(1,209)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	2	101.91
(1,548)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	17	101.88
(1,591)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	7	101.83
(1,612)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	9	101.79
(1,548)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	2	101.79
(1,447)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	20	101.79
(1,413)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:PHE:N	13	101.74
(1,447)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	4	101.73
(1,589)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	16	101.66
(1,187)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	14	101.62
(1,675)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	6	101.61
(1,168)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	10	101.61
(1,168) $(1,467)$	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	6	101.55
(1,407) $(1,629)$	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	2	101.52
(1,029) $(1,467)$	1:A:144.F KO:C 1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	7	101.45
(1,401)	1.A.30.GL1.N	1.A.30.GLI.OA	1.A.30.GL1.C	1.A.91.LUU.IN		101.40



	ed from previous pag				3.6.1.1	T 71 1 11 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,388)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	20	101.44
(1,174)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	1	101.44
(1,313)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	17	101.42
(1,180)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	11	101.4
(1,591)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	16	101.39
(1,589)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	13	101.35
(1,478)	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	13	101.32
(1,361)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	7	101.3
(1,503)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	20	101.25
(1,511)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	3	101.24
(1,185)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	20	101.23
(1,563)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	3	101.19
(1,500)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	7	101.15
(1,468)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	5	101.12
(1,620)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	13	101.01
(1,273)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	16	101.01
(1,644)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	1:A:148:ARG:N	6	100.99
(1,665)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	5	100.94
(1,511)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	18	100.91
(1,170)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	5	100.85
(1,427)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	7	100.81
(1,564)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	18	100.75
(1,639)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	2	100.71
(1,673)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1	100.66
(1,440)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	6	100.63
(1,268)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	7	100.61
(1,617)	1:A:141:GLU:C	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	11	100.58
(1,612)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	12	100.53
(1,452)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	19	100.51
(1,448)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	3	100.45
(1,389)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	6	100.45
(1,555)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	14	100.43
(1,548)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	15	100.43
(1,345)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	9	100.41
(1,328)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	20	100.41
(1,431)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	13	100.34
(1,466)	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	11	100.32
(1,447)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	11	100.32
(1,548)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	5	100.17
(1,667)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	16	100.16
(1,667)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	19	100.08
(1,393)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	6	100.07
(1,173)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	5	100.02
(1,511)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	19	99.98
(1,548)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	10	99.95
(1,546) $(1,506)$	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	13	99.89
(1,500) $(1,527)$	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	16	99.88
(1,617)	1:A:141:GLU:C	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	7	99.83
(1,632)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	15	99.79
(1,032) $(1,192)$	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	4	99.74
(1,132) $(1,270)$	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	8	99.73
(1,410)	1.11.20.11111.0	1.71.23.0111.11	1.11.23.0EII.OA	1.11.23.0111.0		99.13



	ed from previous pag		A	A	3.6.1.1	T 71 1 (1)
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,499)	1:A:103:ILE:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	10	99.72
(1,195)	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	1:A:6:GLN:CD	16	99.7
(1,442)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	8	99.68
(1,340)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	4	99.66
(1,199)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	14	99.62
(1,172)	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	5	99.57
(1,644)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	1:A:148:ARG:N	15	99.52
(1,361)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	6	99.52
(1,345)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	8	99.41
(1,499)	1:A:103:ILE:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	15	99.4
(1,669)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	18	99.34
(1,564)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	9	99.33
(1,307)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	4	99.32
(1,431)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	8	99.24
(1,633)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	20	99.22
(1,500)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	1	99.22
(1,413)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:PHE:N	9	99.21
(1,552)	1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:CA	1:A:123:ASN:CB	1:A:123:ASN:CG	16	99.17
(1,684)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	20	99.16
(1,303)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	16	99.12
(1,307)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	6	99.11
(1,452)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	17	99.05
(1,589)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	12	99.04
(1,564)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	19	99.02
(1,303)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	20	98.93
(1,548)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	14	98.87
(1,563)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	4	98.75
(1,190)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	19	98.75
(1,675)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	20	98.7
(1,384)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	14	98.68
(1,241)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	18	98.68
(1,179)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	5	98.67
(1,465)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	6	98.63
(1,427)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	11	98.6
(1,500)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	10	98.58
(1,449)	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	8	98.49
(1,672)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	11	98.46
(1,480)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	9	98.37
(1,559)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	5	98.36
(1,197)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	6	98.31
(1,390)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	16	98.26
(1,365)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	18	98.26
(1,661)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	14	98.24
(1,511)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	2	98.22
(1,541)	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	1:A:118:LYS:CD	6	98.16
(1,511)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	16	98.12
(1,431)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	14	98.08
(1,612)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	7	98.07
(1,467)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	4	98.07
(1,361)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	17	98.05
· · /						
(1,633)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	5	98.01



	$\frac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom 1	Model	Violetien (a)
Key				Atom-4	Model	Violation (°)
(1,449)	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	12	98.01
(1,413)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:PHE:N	5	97.95
(1,293)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	6	97.94
(1,345)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	19	97.88
(1,179)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	9	97.88
(1,358)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	9	97.85
(1,187)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	7	97.83
(1,449)	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	14	97.74
(1,320)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	19	97.67
(1,269)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	15	97.64
(1,548)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	20	97.59
(1,274)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	19	97.59
(1,564)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	10	97.55
(1,209)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	19	97.53
(1,408)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	15	97.52
(1,548)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	13	97.49
(1,389)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	8	97.49
(1,190)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1	97.49
(1,633)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	12	97.47
(1,358)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	20	97.45
(1,480)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	17	97.44
(1,600)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	8	97.36
(1,617)	1:A:141:GLU:C	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	6	97.26
(1,233)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	7	97.24
(1,209)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	17	97.22
(1,672)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	17	97.2
(1,449)	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	15	97.16
(1,466)	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	13	97.13
(1,480)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1	97.1
(1,503)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	18	96.97
(1,197)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	5	96.92
(1,478)	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	7	96.9
(1,293)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	19	96.88
(1,209)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	18	96.83
(1,440)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	4	96.81
(1,452)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	7	96.74
(1,413)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:PHE:N	6	96.68
(1,675)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	17	96.6
(1,449)	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	17	96.6
(1,361)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	9	96.54
(1,391)	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	12	96.48
(1,361)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	14	96.48
(1,449)	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	10	96.46
(1,666)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	15	96.43
(1,174)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	6	96.38
(1,447)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	18	96.36
(1,447) $(1,270)$	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	1	96.33
(1,594)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	3	96.32
(1,394) $(1,240)$	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	13	96.28
(1,240) $(1,439)$	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	16	96.27
(1,439) $(1,612)$	1:A:01:VAL:C 1:A:140:ALA:C	1:A:82:GLU:N 1:A:141:GLU:N	1:A:82:GLU:CA 1:A:141:GLU:CA	1:A:02:GLU:C 1:A:141:GLU:C	2	96.23
(1,012)	1:A:140:ALA:U	1:A:141:GLU:N	1.A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:U		90.23



(1,667)	Atom-1 1:A:154:MET:C	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\mathbf{Violation} (\circ)$
	1 · A · 154 · M F ′ I · C				4.0	00.10
		1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	12	96.19
(1,639)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	16	96.16
(1,511)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	6	96.03
(1,408)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	14	95.98
(1,499)	1:A:103:ILE:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	8	95.96
(1,639)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	17	95.91
(1,313)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1	95.87
(1,433)	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	1:A:79:GLY:CA	1:A:79:GLY:C	1	95.85
(1,268)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	4	95.81
(1,350)	1:A:49:GLN:C	1:A:50:GLY:N	1:A:50:GLY:CA	1:A:50:GLY:C	4	95.76
(1,273)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	13	95.71
(1,427)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	10	95.7
(1,303)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	13	95.57
(1,584)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	8	95.55
(1,480)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	14	95.55
(1,307)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	3	95.51
(1,566)	1:A:128:SER:C	1:A:129:GLY:N	1:A:129:GLY:CA	1:A:129:GLY:C	4	95.5
(1,313)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	18	95.49
(1,448)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	6	95.48
(1,566)	1:A:128:SER:C	1:A:129:GLY:N	1:A:129:GLY:CA	1:A:129:GLY:C	1	95.44
(1,307)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	16	95.4
(1,669)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	19	95.39
(1,358)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	8	95.39
(1,293)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	15	95.38
(1,633)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	7	95.33
(1,240)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	19	95.26
(1,511)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	8	95.25
(1,445)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	14	95.25
(1,447)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	19	95.24
(1,612)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	8	95.11
(1,612)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	19	95.09
(1,511)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	17	95.06
(1,591)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	4	95.02
(1,232)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	3	95.02
(1,373)	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	1:A:60:ARG:CD	17	95.01
(1,185)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	13	95.01
(1,633)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	17	95.0
(1,598)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	6	94.99
(1,448)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	15	94.99
(1,315)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	2	94.98
(1,303)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	3	94.97
(1,672)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	19	94.95
(1,613)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	6	94.76
(1,679)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	4	94.75
(1,293)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	4	94.75
(1,500)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	13	94.74
(1,293)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	11	94.71
(1,328)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	12	94.65
(1,633)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	19	94.62
() /						94.56
(1,465)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	7	94.00



	ed from previous pag		A		3.5 1.1	T 79 1 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,293)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	16	94.43
(1,307)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	9	94.42
(1,623)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	12	94.4
(1,199)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	6	94.38
(1,365)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	12	94.36
(1,433)	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	1:A:79:GLY:CA	1:A:79:GLY:C	20	94.33
(1,515)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	14	94.3
(1,365)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	7	94.27
(1,431)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	15	94.19
(1,478)	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	18	94.17
(1,209)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	20	94.17
(1,197)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	4	94.13
(1,515)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	13	94.09
(1,633)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	11	94.08
(1,576)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	9	93.96
(1,564)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	12	93.92
(1,413)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:PHE:N	20	93.75
(1,199)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	18	93.73
(1,408)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	3	93.71
(1,503)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	1	93.68
(1,358)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	11	93.56
(1,257)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	4	93.54
(1,465)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	3	93.53
(1,181)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	16	93.53
(1,358)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	7	93.51
(1,515)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	1	93.45
(1,661)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	20	93.41
(1,600)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	19	93.41
(1,661)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	19	93.31
(1,597)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	13	93.3
(1,382)	1:A:62:PHE:C	1:A:63:GLY:N	1:A:63:GLY:CA	1:A:63:GLY:C	5	93.25
(1,373)	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	1:A:60:ARG:CD	8	93.21
(1,433)	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	1:A:79:GLY:CA	1:A:79:GLY:C	10	93.17
(1,679)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	1	93.15
(1,596)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1	93.09
(1,192)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	14	93.06
(1,499)	1:A:103:ILE:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	14	93.05
(1,548)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	11	93.02
(1,307)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	18	93.02
(1,427)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	18	93.01
(1,270)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	9	92.74
(1,433)	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	1:A:79:GLY:CA	1:A:79:GLY:C	3	92.7
(1,602)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	11	92.62
(1,584)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	3	92.61
(1,478)	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	14	92.59
(1,446)	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	1:A:83:GLY:CA	1:A:83:GLY:C	4	92.53
(1,169)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	9	92.48
(1,564)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	1	92.43
(1,232)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	20	92.38
	1:A:103:ILE:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	3	92.37
(1,499)	1.71.100.1111.0					



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\mathbf{Violation} \; (\circ)$
(1,665)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	9	92.25
(1,410)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	12	92.22
(1,439)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	2	92.18
(1,185)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	3	92.16
(1,656)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	12	92.06
(1,358)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	15	91.99
(1,358)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	14	91.97
(1,390)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	12	91.96
(1,431)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	20	91.94
(1,468)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	4	91.93
(1,345)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	4	91.93
(1,168)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	8	91.92
(1,540)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	17	91.91
(1,391)	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1	91.86
(1,441)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	4	91.85
(1,590)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	2	91.82
(1,445)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	6	91.82
(1,591)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	9	91.79
(1,611)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	5	91.74
(1,209)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	10	91.74
(1,505)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	10	91.73
(1,647)	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	1:A:148:ARG:CD	18	91.72
(1,602)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	19	91.7
(1,413)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:PHE:N	4	91.63
(1,218)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	10	91.63
(1,500)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	8	91.62
(1,391)	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	18	91.56
(1,168)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	7	91.56
(1,500)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	17	91.51
(1,433)	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	1:A:79:GLY:CA	1:A:79:GLY:C	2	91.51
(1,575)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	14	91.49
(1,384)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	20	91.49
(1,358)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	16	91.46
(1,465)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	19	91.44
(1,365)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	15	91.42
(1,345)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	12	91.42
(1,611)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	3	91.38
(1,293)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	20	91.37
(1,448)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	14	91.35
(1,392)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	14	91.34
(1,617)	1:A:141:GLU:C	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	18	91.32
(1,240)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	9	91.32
(1,602)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	18	91.3
(1,449)	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	16	91.17
(1,500)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	2	91.14
(1,479)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	8	91.11
(1,439)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	5	91.11
(1,232)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	2	91.0
(1,232)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	17	90.97
(1,390)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	17	90.94
				1:A:67:GLY:N	19	



	ed from previous pag				36 11	T70 1 .0 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,365)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	4	90.88
(1,674)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	5	90.85
(1,612)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	18	90.8
(1,313)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	4	90.8
(1,204)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	1:A:8:VAL:N	9	90.75
(1,511)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	9	90.72
(1,358)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	18	90.71
(1,209)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	8	90.67
(1,667)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1	90.62
(1,427)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	15	90.51
(1,358)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	17	90.51
(1,408)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	20	90.45
(1,185)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	15	90.41
(1,499)	1:A:103:ILE:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	20	90.21
(1,273)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	9	90.19
(1,197)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	11	90.17
(1,270)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	3	90.15
(1,305)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	19	90.03
(1,345)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	1	90.0
(1,640)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	5	89.98
(1,644)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	1:A:148:ARG:N	7	89.95
(1,358)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	5	89.92
(1,500)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	20	89.9
(1,500)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	5	89.86
(1,564)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	17	89.85
(1,478)	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	16	89.83
(1,413)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:PHE:N	3	89.8
(1,499)	1:A:103:ILE:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	9	89.78
(1,457)	1:A:86:ARG:C	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:C	15	89.77
(1,591)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	1	89.72
(1,181)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	4	89.72
(1,639)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	4	89.71
(1,187)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	16	89.71
(1,181)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	18	89.68
(1,500)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	4	89.67
(1,633)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	14	89.61
(1,500)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	16	89.61
(1,204)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	1:A:8:VAL:N	5	89.61
(1,500)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	14	89.59
(1,503)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	8	89.54
(1,431)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	5	89.54
(1,197)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	15	89.54
(1,500)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	9	89.45
(1,300) $(1,449)$	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	2	89.45
(1,480)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	6	89.25
(1,480) $(1,589)$	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	7	89.23
(1,633)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	9	89.21
(1,033) $(1,186)$	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	3	89.17
(1,130) $(1,241)$	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	5	89.14
(1,241) $(1,500)$	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	15	89.09
(1,566)	1:A:104:GLY:N 1:A:128:SER:C	1:A:104:GLY:CA 1:A:129:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:109:FKO:N 1:A:129:GLY:C	2	89.07
(1,500)	1.A.120.5ER.C	1.A.129.GL1.N	1.A.129.GL1.UA	1.A.129.GL1.U		09.01



	ed from previous pag		A 4 9	A 1 4	N.C. 1.1	37. 1. 4. ()
(1.500)	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,509)	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	12	89.03
(1,500)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	19	89.01
(1,273)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	3	89.0
(1,686)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	20	88.96
(1,179)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	3	88.9
(1,467)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	5	88.88
(1,548)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	4	88.83
(1,584)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	12	88.77
(1,273)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	19	88.73
(1,365)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	10	88.72
(1,597)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	11	88.68
(1,499)	1:A:103:ILE:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1	88.67
(1,515)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	4	88.66
(1,500)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	11	88.66
(1,273)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	20	88.58
(1,589)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1	88.57
(1,345)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	13	88.57
(1,468)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	7	88.55
(1,576)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	14	88.51
(1,478)	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	15	88.51
(1,584)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	4	88.48
(1,468)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	6	88.45
(1,365)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	2	88.44
(1,187)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	15	88.42
(1,388)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	4	88.35
(1,232)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	9	88.35
(1,667)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	17	88.34
(1,392)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	15	88.29
(1,506)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	10	88.27
(1,442)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	4	88.15
(1,602)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	10	88.14
(1,589)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	5	88.14
(1,633)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	2	88.11
(1,584)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	13	88.0
(1,382)	1:A:62:PHE:C	1:A:63:GLY:N	1:A:63:GLY:CA	1:A:63:GLY:C	12	87.97
(1,673)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	14	87.96
(1,174)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	16	87.88
(1,623)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	13	87.85
(1,204)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	1:A:8:VAL:N	6	87.85
(1,633)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	8	87.82
(1,411)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	12	87.78
(1,345)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	20	87.78
(1,198)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	19	87.73
(1,678)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	17	87.72
(1,685)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	7	87.68
(1,170)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	1	87.64
(1,511)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	4	87.63
(1,365)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	9	87.58
(1,315)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	19	87.57
(1,612)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	13	87.56
		i .	1		1	



Key	$egin{array}{c} ext{ed from previous pag} \ ext{ } ext{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,657)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	2	87.47
(1,683)	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	1:A:157:GLU:CD	17	87.46
(1,233)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	15	87.41
(1,440)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	20	87.37
(1,365)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	13	87.36
(1,199)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	4	87.36
(1,192)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	12	87.36
(1,612)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	6	87.34
(1,445)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	11	87.32
(1,672)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	20	87.27
(1,672)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	9	87.24
(1,499)	1:A:103:ILE:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	2	87.21
(1,445)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	12	87.19
(1,467)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	14	87.17
(1,393)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	10	87.15
(1,192)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	5	87.08
(1,678)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	13	86.92
(1,408)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1	86.82
(1,564)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	20	86.73
(1,190)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	15	86.66
(1,197)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	2	86.62
(1,313)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	8	86.59
(1,672)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	2	86.52
(1,633)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	6	86.49
(1,621)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	4	86.48
(1,365)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	17	86.47
(1,644)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	1:A:148:ARG:N	1	86.46
(1,665)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	19	86.45
(1,431)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	3	86.44
(1,444)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	19	86.4
(1,480)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	16	86.35
(1,168)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	14	86.35
(1,427)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1	86.33
(1,345)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	15	86.29
(1,667)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	5	86.23
(1,511)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	5	86.15
(1,209)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	12	86.15
(1,668)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	7	86.08
(1,575)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	9	86.04
(1,168)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	13	86.01
(1,503)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	11	85.93
(1,197)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	3	85.92
(1,408)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	17	85.91
(1,445)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	17	85.84
(1,661)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	8	85.8
(1,499)	1:A:103:ILE:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	12	85.76
(1,209)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	13	85.71
(1,439)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	10	85.68
(1,602)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	1	85.53
` ' /	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	1:A:8:VAL:N	15	85.51
(1,204)	1.71.1.1 1117.18					



Key	$\frac{d \ from \ previous \ pag}{\textbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,449)	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	7	85.32
(1,449) $(1,179)$	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	6	85.31
(1,179) $(1,209)$	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	6	85.27
(1,209) $(1,614)$	1:A:141:GLU:N	1:A:10:GLU:N 1:A:141:GLU:CA	1:A:10:GLU:CA 1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	6	85.24
(1,014) $(1,181)$	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CG	1	85.24
(1,181) $(1,597)$	1:A:136:LEU:C	1:A:4:GLU:N 1:A:137:ASP:N	1:A:4:GLU:CA 1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	12	85.12
(1,313)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	10	85.11
(1,313) $(1,305)$	1:A:42:ILE:N 1:A:41:ASP:N	1:A:42:ILE:CA 1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	1:A:43:LEU:N 1:A:42:ILE:N	3	85.1
(1,303) $(1,468)$	1:A:90:GLY:N	1:A:41:ASF:CA 1:A:90:GLY:CA	1:A:41:A5F:C 1:A:90:GLY:C	1:A:42:ILE:N 1:A:91:LEU:N	1	85.06
(1,408) $(1,395)$	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	16	85.05
(1,393) $(1,390)$	1:A:64:MET:C	1:A:67:GLY:N 1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	11	85.0
(, ,	1:A:40:HIS:C	1:A:05:SER:N 1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	18	85.0
(1,303)	1:A:40:HIS:C 1:A:105:PRO:N	1:A:41:ASP:N 1:A:105:PRO:CA	1:A:41:A5P:CA 1:A:105:PRO:C	1:A:41:ASP:C 1:A:106:TYR:N	7	
(1,503)	1:A:64:MET:C	1:A:105:PRO:CA 1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	15	84.91
(1,389)						84.91
(1,589)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	10	84.86
(1,445)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	10	84.83
(1,434)	1:A:79:GLY:C	1:A:80:GLY:N	1:A:80:GLY:CA	1:A:80:GLY:C	18	84.82
(1,192)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	16	84.76
(1,439)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1	84.73
(1,192)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	3	84.71
(1,449)	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	11	84.69
(1,504)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	5	84.63
(1,515)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	5	84.59
(1,204)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	1:A:8:VAL:N	12	84.57
(1,684)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	10	84.5
(1,448)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	16	84.5
(1,480)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	4	84.45
(1,306)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1	84.4
(1,515)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	10	84.36
(1,511)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	12	84.36
(1,617)	1:A:141:GLU:C	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	9	84.35
(1,602)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	17	84.32
(1,504)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	9	84.31
(1,439)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	8	84.27
(1,640)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1	84.26
(1,478)	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	11	84.19
(1,204)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	1:A:8:VAL:N	13	84.17
(1,448)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	8	84.09
(1,633)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	16	84.04
(1,276)	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	1:A:30:GLU:CD	14	83.79
(1,598)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	2	83.78
(1,408)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	4	83.74
(1,305)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	11	83.71
(1,170)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	7	83.68
(1,673)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	6	83.64
(1,198)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	5	83.63
(1,394)	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	20	83.5
(1,389)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	5	83.5
(1,272)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	8	83.5
(1,559)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	13	83.42
(1,478)	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	9	83.42



	ed from previous pag		A + 2	A + 4	N/L-1-1	17:-1-4: (-)
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,445)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	9	83.42
(1,392)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	11	83.36
(1,405)	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	1:A:70:GLU:CD	9	83.25
(1,434)	1:A:79:GLY:C	1:A:80:GLY:N	1:A:80:GLY:CA	1:A:80:GLY:C	6	83.22
(1,181)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	15	83.21
(1,684)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	13	83.2
(1,365)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	8	83.11
(1,583)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	14	83.01
(1,187)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	8	82.99
(1,197)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	13	82.97
(1,365)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	5	82.91
(1,633)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	4	82.87
(1,365)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	16	82.87
(1,431)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	9	82.79
(1,439)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	18	82.78
(1,408)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	19	82.75
(1,563)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	16	82.74
(1,303)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	11	82.71
(1,408)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	9	82.61
(1,413)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:PHE:N	2	82.6
(1,192)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	13	82.55
(1,275)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	19	82.41
(1,601)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	9	82.36
(1,169)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	3	82.36
(1,433)	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	1:A:79:GLY:CA	1:A:79:GLY:C	18	82.28
(1,204)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	1:A:8:VAL:N	11	82.27
(1,360)	1:A:54:SER:C	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	4	82.22
(1,431)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	12	82.17
(1,226)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	8	82.15
(1,511)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	7	82.07
(1,186)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	4	82.07
(1,240)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	8	82.01
(1,440)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	19	81.84
(1,408)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	6	81.82
(1,640)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	4	81.8
(1,467)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	10	81.8
(1,395)	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	10	81.73
(1,240)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	6	81.56
(1,240)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	10	81.51
(1,197)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1	81.51
(1,302)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	19	81.5
(1,487)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	7	81.47
(1,365)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	20	81.38
(1,233)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	5	81.38
(1,597)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	8	81.35
(1,566)	1:A:128:SER:C	1:A:129:GLY:N	1:A:129:GLY:CA	1:A:129:GLY:C	17	81.34
(1,665)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	14	81.33
(1,602)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	4	81.31
(1,392)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	8	81.3
(1,181)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	8	81.29
(1,445)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	20	81.24



Violation (∘) 81.23 81.23 81.14 81.11 81.09 81.08 81.04 81.03 81.03 81.01 81.0 80.91 80.89 80.89 80.89 80.82 80.72 80.72
81.23 81.14 81.11 81.09 81.09 81.08 81.04 81.03 81.03 81.01 81.0 80.91 80.89 80.89 80.89 80.83 80.82 80.72
81.14 81.11 81.09 81.09 81.08 81.04 81.03 81.03 81.01 80.91 80.89 80.89 80.89 80.89 80.82 80.72
81.11 81.09 81.09 81.08 81.04 81.03 81.03 81.01 80.91 80.89 80.89 80.89 80.89 80.82 80.72
81.09 81.09 81.08 81.04 81.03 81.01 81.0 80.91 80.89 80.89 80.89 80.83 80.82 80.72
81.09 81.08 81.04 81.03 81.03 81.01 81.0 80.91 80.89 80.89 80.89 80.83 80.82 80.72
81.08 81.04 81.03 81.03 81.01 81.0 80.91 80.89 80.89 80.87 80.83 80.82 80.72
81.04 81.03 81.03 81.01 81.0 80.91 80.89 80.89 80.89 80.82 80.72
81.03 81.03 81.01 81.0 80.91 80.89 80.89 80.87 80.83 80.82 80.72
81.03 81.01 81.0 80.91 80.89 80.89 80.87 80.83 80.82 80.72
81.01 81.0 80.91 80.89 80.89 80.87 80.83 80.82 80.72
81.0 80.91 80.89 80.89 80.87 80.83 80.82 80.72
80.91 80.89 80.89 80.87 80.83 80.82 80.72
80.89 80.89 80.87 80.83 80.82 80.72
80.89 80.87 80.83 80.82 80.72
80.87 80.83 80.82 80.72
80.83 80.82 80.72
80.82 80.72
80.72
80.72
00 _
80.66
80.65
80.61
80.59
80.53
80.53
80.52
80.48
80.46
80.43
80.38
80.38
80.33
80.32
80.3
80.21
80.18
80.11
80.11
80.05
79.95
79.95
79.93
79.78
79.72
79.67
79.63
79.62
79.62



Violation (°) 79.49 79.49 79.47 79.44 79.3 79.29 79.19 79.12 79.07 79.06 78.96 78.89 78.85 78.77 78.71 78.68 78.58 78.58 78.58 78.43
79.49 79.47 79.44 79.3 79.29 79.25 79.19 79.12 79.06 78.96 78.89 78.86 78.85 78.77 78.71 78.7 78.68 78.58 78.58 78.58
79.47 79.44 79.3 79.29 79.25 79.19 79.12 79.07 79.06 78.96 78.89 78.85 78.77 78.71 78.7 78.68 78.58 78.58 78.58
79.44 79.3 79.29 79.25 79.19 79.12 79.07 79.06 78.96 78.89 78.85 78.77 78.71 78.7 78.68 78.58 78.58 78.58
79.3 79.29 79.25 79.19 79.12 79.06 78.96 78.89 78.86 78.85 78.77 78.71 78.7 78.68 78.58 78.58 78.58
79.29 79.25 79.19 79.12 79.07 79.06 78.96 78.89 78.85 78.77 78.71 78.7 78.68 78.58 78.58 78.58
79.25 79.19 79.12 79.07 79.06 78.96 78.89 78.85 78.77 78.71 78.7 78.68 78.58 78.58 78.58
79.19 79.12 79.07 79.06 78.96 78.89 78.85 78.77 78.71 78.7 78.68 78.58 78.58 78.58
79.12 79.07 79.06 78.96 78.89 78.85 78.77 78.71 78.7 78.68 78.58 78.58
79.07 79.06 78.96 78.89 78.86 78.77 78.71 78.7 78.68 78.58 78.58
79.06 78.96 78.89 78.86 78.85 78.77 78.71 78.7 78.68 78.58 78.58
78.96 78.89 78.86 78.85 78.77 78.71 78.7 78.68 78.58 78.58
78.89 78.86 78.85 78.77 78.71 78.7 78.68 78.58 78.58 78.51
78.86 78.85 78.77 78.71 78.7 78.68 78.58 78.58 78.51
78.85 78.77 78.71 78.7 78.68 78.58 78.58 78.51
78.77 78.71 78.7 78.68 78.58 78.58 78.51
78.71 78.7 78.68 78.58 78.58 78.51
78.7 78.68 78.58 78.58 78.51
78.68 78.58 78.58 78.51
78.58 78.58 78.51
78.58 78.51
78.51
78.43
78.37
78.32
78.29
78.26
78.1
78.09
78.02
78.01
77.96
77.92
77.81
77.77
77.72
77.71
77.69
77.69
77.44
77.44
77.43
77.32
77.29
77.28
77.27
77.26
77.24
77.24



	ed from previous pag		1 1		7.5 1.1	T70 1 . 0 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,468)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	17	77.07
(1,394)	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	17	77.07
(1,209)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	11	77.06
(1,468)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	16	77.03
(1,503)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	15	76.97
(1,499)	1:A:103:ILE:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	16	76.97
(1,383)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	10	76.88
(1,468)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	19	76.75
(1,633)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	18	76.69
(1,469)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	4	76.68
(1,295)	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	1:A:36:GLU:CD	4	76.66
(1,446)	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	1:A:83:GLY:CA	1:A:83:GLY:C	17	76.64
(1,598)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	19	76.6
(1,480)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	2	76.56
(1,198)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	9	76.51
(1,584)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	7	76.48
(1,408)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	5	76.46
(1,256)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	4	76.46
(1,273)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	17	76.45
(1,227)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	11	76.42
(1,210)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	14	76.42
(1,552)	1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:CA	1:A:123:ASN:CB	1:A:123:ASN:CG	2	76.41
(1,365)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	6	76.4
(1,214)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	8	76.4
(1,431)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	6	76.27
(1,316)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1	76.27
(1,302)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	15	76.18
(1,673)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	10	76.17
(1,395)	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	4	76.11
(1,168)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	3	76.11
(1,408)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	7	76.08
(1,439)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	12	76.06
(1,577)	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	1:A:133:GLU:CD	7	76.05
(1,171)	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:CB	1:A:2:ASP:CG	1	76.02
(1,174)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	3	75.99
(1,445)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	1	75.98
(1,559)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	6	75.71
(1,530)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	15	75.7
(1,170)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	18	75.61
(1,482)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	15	75.6
(1,617)	1:A:141:GLU:C	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	13	75.54
(1,668)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	3	75.46
(1,431)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	10	75.36
(1,388)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	15	75.33
(1,431)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	1	75.25
(1,388)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	5	75.23
(1,445)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	16	75.19
(1,584)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	1	75.17
, , ,						
· · /						
(1,564)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	6	74.98
(1,269) (1,382)	1:A:28:MET:C 1:A:62:PHE:C	1:A:29:SER:N 1:A:63:GLY:N	1:A:29:SER:CA 1:A:63:GLY:CA	1:A:29:SER:C 1:A:63:GLY:C	10 18	75.1 75.02



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,197)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	7	74.92
(1,571)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	17	74.88
(1,430)	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	1:A:78:GLU:CD	17	74.83
(1,457)	1:A:86:ARG:C	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:C	8	74.69
(1,187)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	13	74.69
(1,232)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	19	74.67
(1,469)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	14	74.63
(1,382)	1:A:62:PHE:C	1:A:63:GLY:N	1:A:63:GLY:CA	1:A:63:GLY:C	20	74.58
(1,190)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	13	74.56
(1,181)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	3	74.54
(1,600)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	12	74.37
(1,214)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	10	74.37
(1,285)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	18	74.29
(1,209)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1	74.25
(1,632)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	1	74.22
(1,232)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	11	74.22
(1,382)	1:A:62:PHE:C	1:A:63:GLY:N	1:A:63:GLY:CA	1:A:63:GLY:C	19	74.12
(1,192)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	6	74.12
(1,232)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	4	74.11
(1,445)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	5	74.07
(1,559)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	17	74.02
(1,168)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	4	74.01
(1,439)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	7	73.88
(1,668)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	17	73.8
(1,302)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	17	73.76
(1,276)	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	1:A:30:GLU:CD	4	73.73
(1,683)	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	1:A:157:GLU:CD	4	73.69
(1,595)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	3	73.68
(1,639)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	12	73.67
(1,221)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	4	73.66
(1,666)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	9	73.59
(1,405)	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	1:A:70:GLU:CD	18	73.56
(1,447)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	5	73.52
(1,590)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	6	73.51
(1,393)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	20	73.51
(1,485)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	14	73.47
(1,593)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	16	73.46
(1,446)	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	1:A:83:GLY:CA	1:A:83:GLY:C	20	73.46
(1,426)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	5	73.45
(1,530)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	11	73.44
(1,522)	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	1:A:110:GLU:CD	2	73.41
(1,599)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:CB	1:A:137:ASP:CG	10	73.35
(1,615)	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	1:A:141:GLU:CD	16	73.34
(1,260)	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	1:A:25:GLN:CD	6	73.33
(1,313)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	16	73.32
(1,672)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	8	73.29
(1,413)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:PHE:N	1	73.28
(1,415) $(1,405)$	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	1:A:70:GLU:CD	5	73.28
(1,382)	1:A:62:PHE:C	1:A:63:GLY:N	1:A:63:GLY:CA	1:A:63:GLY:C	9	73.23
(1,592) $(1,599)$	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:CB	1:A:137:ASP:CG	20	73.21
· · /						
(1,640)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	17	73.15



	ed from previous pag		A	A 1 4	3.6 1.1	T 7* 1 (* ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,268)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	20	73.02
(1,232)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	10	72.88
(1,499)	1:A:103:ILE:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	4	72.86
(1,304)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:CB	1:A:41:ASP:CG	20	72.85
(1,232)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	8	72.74
(1,564)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	7	72.73
(1,450)	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	1:A:85:GLY:CA	1:A:85:GLY:C	16	72.72
(1,320)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	20	72.69
(1,499)	1:A:103:ILE:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	13	72.68
(1,469)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	19	72.67
(1,204)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	1:A:8:VAL:N	19	72.5
(1,442)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	10	72.42
(1,685)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	16	72.3
(1,469)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	13	72.29
(1,509)	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	19	72.28
(1,342)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:GLY:N	1:A:48:GLY:CA	1:A:48:GLY:C	1	72.27
(1,589)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	14	72.24
(1,651)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	11	72.23
(1,590)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	18	72.23
(1,597)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	18	72.18
(1,296)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	14	72.18
(1,480)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	13	72.17
(1,499)	1:A:103:ILE:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	6	72.03
(1,413)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:PHE:N	8	72.03
(1,344)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	10	72.0
(1,584)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	9	71.99
(1,509)	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	2	71.96
(1,430)	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	1:A:78:GLU:CD	6	71.78
(1,584)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	16	71.76
(1,232)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	14	71.68
(1,612)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	16	71.65
(1,226)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	19	71.62
(1,272)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	18	71.54
(1,197)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	12	71.5
(1,583)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	6	71.47
(1,479)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	5	71.47
(1,593)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	15	71.38
(1,429)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	1	71.37
(1,190)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	17	71.22
(1,433)	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	1:A:79:GLY:CA	1:A:79:GLY:C	4	71.18
(1,600)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	7	71.16
(1,559)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	12	71.16
(1,499)	1:A:103:ILE:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	5	71.14
(1,232)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	18	71.11
(1,444)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	18	71.06
(1,384)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	2	71.06
(1,454)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	8	71.02
(1,209)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	4	71.02
(1,563)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	14	71.01
(1,667)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	8	70.96



$\mathbf{olation} \; (\; \circ \;)$
TO TO
70.79
70.78
70.77
70.76
70.75
70.72
70.69
70.64
70.55
70.53
70.49
70.44
70.44
70.42
70.42
70.41
70.39
70.35
70.32
70.32
70.23
70.16
70.13
70.12
70.11
70.1
70.07
70.05
70.02
70.01
69.94
69.94
69.9
69.9
69.89
69.84
69.84
69.82
69.69
69.69
69.68
69.64
69.6
69.57
69.56
69.51
69.49
69.48
69.47
69.4
09.4



Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,195)	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	1:A:6:GLN:CD	11	69.37
(1,469)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	20	69.35
(1,449)	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	3	69.35
(1,302)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	2	69.22
(1,187)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	5	69.21
(1,226)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	9	69.2
(1,276)	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	1:A:30:GLU:CD	18	69.1
(1,440)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	14	69.08
(1,644)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	1:A:148:ARG:N	4	69.07
(1,666)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	8	69.04
(1,600)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	15	69.02
(1,226)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	10	69.01
(1,564)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	14	68.99
(1,301) $(1,210)$	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	4	68.98
(1,383)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	2	68.94
(1,333) $(1,233)$	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	18	68.89
(1,233) $(1,334)$	1:A:45:LEU:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	9	68.85
(1,334) $(1,468)$	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	15	68.81
(1,400) $(1,640)$	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	7	68.66
(1,325)	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	1:A:44:GLN:CD	18	68.66
(1,634)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	3	68.64
(1,533)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	16	68.62
(1,333) $(1,413)$	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:PHE:N	16	68.6
(1,413) $(1,584)$	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	6	68.53
· · /	1:A:95:GLY:C	1:A:155:1 1 K:N 1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	5	68.53
(1,480)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	18	68.46
(1,273)	1:A:29:SER:C 1:A:82:GLU:CA	1:A:80:GLU:N 1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	1:A:82:GLU:CD	5	68.43
(1,443)						
(1,469)	1:A:91:LEU:N 1:A:90:GLY:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB 1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:CG	6 2	68.41 68.38
(1,468)		1:A:90:GLY:CA		1:A:91:LEU:N		
(1,611)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	16	68.35
(1,320)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	15	68.35
(1,429)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	18	68.33
(1,233)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	14	68.32
(1,596)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	8	68.27
(1,171)	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:CB	1:A:2:ASP:CG	16	68.26
(1,583)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	16	68.24
(1,445)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	8	68.21
(1,316)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	20	68.21
(1,485)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	4	68.12
(1,204)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	1:A:8:VAL:N	8	68.12
(1,600)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	13	68.1
(1,672)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	15	68.05
(1,583)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	9	68.01
(1,345)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	10	68.0
(1,394)	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	6	67.99
(1,559)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	19	67.94
(1,593)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	7	67.93
(1,320)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	8	67.9
(1,617)	1:A:141:GLU:C	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	2	67.89
(1,479)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	13	67.83
(1,598)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	18	67.82



	ed from previous pag		A 4	A 4	N.E. 1.1	37. 1. 4. ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,197)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	8	67.78
(1,591)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	18	67.77
(1,485)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	2	67.76
(1,566)	1:A:128:SER:C	1:A:129:GLY:N	1:A:129:GLY:CA	1:A:129:GLY:C	8	67.74
(1,686)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	16	67.7
(1,457)	1:A:86:ARG:C	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:C	16	67.69
(1,168)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	18	67.63
(1,592)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	17	67.58
(1,413)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:PHE:N	19	67.58
(1,365)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	11	67.54
(1,446)	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	1:A:83:GLY:CA	1:A:83:GLY:C	11	67.48
(1,552)	1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:CA	1:A:123:ASN:CB	1:A:123:ASN:CG	10	67.46
(1,599)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:CB	1:A:137:ASP:CG	5	67.36
(1,395)	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	11	67.35
(1,563)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	7	67.27
(1,559)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	18	67.26
(1,233)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	8	67.26
(1,329)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1	67.23
(1,668)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	14	67.17
(1,225)	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	1:A:13:GLU:CD	7	67.17
(1,168)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	6	67.17
(1,233)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	10	67.12
(1,294)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	17	67.05
(1,373)	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	1:A:60:ARG:CD	15	67.03
(1,656)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	8	66.9
(1,552)	1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:CA	1:A:123:ASN:CB	1:A:123:ASN:CG	14	66.86
(1,636)	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	1:A:146:GLN:CD	18	66.81
(1,668)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	9	66.8
(1,673)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	13	66.74
(1,467)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	11	66.68
(1,284)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	8	66.67
(1,499)	1:A:103:ILE:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	7	66.61
(1,427)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	5	66.55
(1,591)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	6	66.49
(1,392)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	20	66.49
(1,448)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	5	66.48
(1,372)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	9	66.47
(1,566)	1:A:128:SER:C	1:A:129:GLY:N	1:A:129:GLY:CA	1:A:129:GLY:C	5	66.45
(1,667)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	9	66.41
(1,644)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	1:A:148:ARG:N	8	66.41
(1,171)	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:CB	1:A:2:ASP:CG	2	66.39
(1,240)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	16	66.36
(1,638)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	12	66.33
(1,559)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	9	66.3
(1,444)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	3	66.27
(1,303)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	17	66.24
(1,334)	1:A:45:LEU:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	15	66.22
(1,446)	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	1:A:83:GLY:CA	1:A:83:GLY:C	1	66.16
(1,682)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	1	66.15
(1,440)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	7	66.12
(1,403)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	16	66.11
(-,-00)	1.1.1.1.0.020.1.1					od on nort nage



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,570)	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	1:A:130:GLU:CD	15	65.99
(1,429)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	2	65.9
(1,233)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	4	65.89
(1,550)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	7	65.88
(1,191)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	6	65.88
(1,589)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	15	65.87
(1,678)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	2	65.86
(1,382)	1:A:62:PHE:C	1:A:63:GLY:N	1:A:63:GLY:CA	1:A:63:GLY:C	6	65.86
(1,589)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	18	65.82
(1,469)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	9	65.79
(1,633)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	1	65.78
(1,233)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	11	65.78
(1,210)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1	65.75
(1,225)	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	1:A:13:GLU:CD	2	65.7
(1,225)	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	1:A:13:GLU:CD	15	65.69
(1,532)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	4	65.68
(1,554)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	8	65.65
(1,627)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	6	65.62
(1,487)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	13	65.61
(1,430)	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	1:A:78:GLU:CD	16	65.61
(1,434)	1:A:79:GLY:C	1:A:80:GLY:N	1:A:80:GLY:CA	1:A:80:GLY:C	10	65.59
(1,329)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	20	65.59
(1,444)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	2	65.58
(1,350)	1:A:49:GLN:C	1:A:50:GLY:N	1:A:50:GLY:CA	1:A:50:GLY:C	18	65.54
(1,195)	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	1:A:6:GLN:CD	3	65.53
(1,429)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	15	65.51
(1,268)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	19	65.51
(1,599)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:CB	1:A:137:ASP:CG	6	65.48
(1,486)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	18	65.47
(1,401)	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	1:A:69:PHE:CD1	19	65.46
(1,225)	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	1:A:13:GLU:CD	8	65.46
(1,180)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	3	65.46
(1,678)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	9	65.45
(1,573)	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	1:A:132:TYR:CD1	5	65.41
(1,204)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	1:A:8:VAL:N	14	65.41
(1,378)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	8	65.37
(1,288)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	4	65.36
(1,305)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	16	65.35
(1,656)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	13	65.33
(1,233)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	19	65.33
(1,186)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	13	65.31
(1,279)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	17	65.27
(1,298)	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	1:A:39:TYR:CD1	10	65.21
(1,285) $(1,285)$	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	17	65.2
(1,592)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1	65.18
(1,531)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	7	65.09
(1,563)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	6	65.02
(1,421)	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	1:A:75:PHE:CD1	12	64.95
(1,421) $(1,540)$	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	4	64.94
(1,340) $(1,401)$	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	1:A:69:PHE:CD1	4	64.91
(1,401) $(1,270)$	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	10	64.9
(1,210)	1.A.20.ME1.0	1.A.29.SER.N	I.A.23.SEII.OA	1.A.23.3ER.O		04.9



	ed from previous pag				36 11	T71 1 11
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,665)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	16	64.89
(1,585)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	15	64.88
(1,528)	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	1:A:113:TYR:CD1	6	64.84
(1,202)	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	1:A:7:PHE:CD1	4	64.84
(1,583)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	1	64.83
(1,304)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:CB	1:A:41:ASP:CG	17	64.78
(1,325)	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	1:A:44:GLN:CD	3	64.76
(1,350)	1:A:49:GLN:C	1:A:50:GLY:N	1:A:50:GLY:CA	1:A:50:GLY:C	15	64.71
(1,430)	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	1:A:78:GLU:CD	8	64.69
(1,282)	1:A:31:LEU:C	1:A:32:GLY:N	1:A:32:GLY:CA	1:A:32:GLY:C	5	64.69
(1,423)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	20	64.68
(1,304)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:CB	1:A:41:ASP:CG	4	64.68
(1,202)	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	1:A:7:PHE:CD1	7	64.66
(1,499)	1:A:103:ILE:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	17	64.63
(1,380)	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	1:A:62:PHE:CD1	18	64.62
(1,394)	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	8	64.59
(1,665)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	8	64.57
(1,376)	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	1:A:61:TYR:CD1	1	64.57
(1,539)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	5	64.56
(1,202)	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	1:A:7:PHE:CD1	14	64.54
(1,486)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	9	64.52
(1,421)	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	1:A:75:PHE:CD1	17	64.51
(1,245)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1	64.51
(1,558)	1:A:126:ASP:N	1:A:126:ASP:CA	1:A:126:ASP:CB	1:A:126:ASP:CG	15	64.47
(1,177)	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	1:A:3:PHE:CD1	16	64.45
(1,445)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	2	64.42
(1,168)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	19	64.42
(1,573)	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	1:A:132:TYR:CD1	2	64.41
(1,169)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	18	64.39
(1,485)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	1	64.38
(1,168)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	11	64.37
(1,657)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1	64.33
(1,394)	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	11	64.33
(1,665)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	6	64.31
(1,592)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	18	64.22
(1,202)	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	1:A:7:PHE:CD1	18	64.22
(1,484)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	8	64.2
(1,573)	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	1:A:132:TYR:CD1	19	64.12
(1,226)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	2	64.1
(1,559)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	4	64.08
(1,225)	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	1:A:13:GLU:CD	13	64.08
(1,592)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	10	64.05
(1,332) $(1,231)$	1:A:16:PRO:N	1:A:16:PRO:CA	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	20	64.05
(1,376)	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	1:A:61:TYR:CD1	10	64.03
(1,640)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	9	64.02
(1,173)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	3	64.01
(1,173) $(1,571)$	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	1	63.94
(1,341) $(1,440)$	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	12	63.94
(1,226)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	5	63.94
(1,220) $(1,570)$	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	1:A:130:GLU:CD	4	63.93
(1,370) $(1,421)$	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	1:A:75:PHE:CD1	16	63.93
(1,441)	1.11.19.1 11E.OA	1.71.19.1 HE.OD	1.71.19.1 111.00	1.71.10.1 1112.011		00.90



	ed from previous pag				36 11	* 7* 1 . • /)
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,409)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	7	63.92
(1,316)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	19	63.91
(1,298)	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	1:A:39:TYR:CD1	7	63.9
(1,648)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	15	63.85
(1,303)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	15	63.82
(1,226)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	3	63.79
(1,678)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	12	63.78
(1,486)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	8	63.78
(1,599)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:CB	1:A:137:ASP:CG	18	63.75
(1,445)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	3	63.73
(1,301)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	12	63.68
(1,240)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1	63.66
(1,603)	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:CB	1:A:138:ASN:CG	17	63.65
(1,421)	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	1:A:75:PHE:CD1	2	63.63
(1,278)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	5	63.61
(1,484)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	3	63.6
(1,423)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	19	63.6
(1,209)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	14	63.58
(1,559)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	8	63.57
(1,559)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	20	63.57
(1,272)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	17	63.55
(1,507)	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	1:A:106:TYR:CD1	7	63.54
(1,409)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	5	63.54
(1,583)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	7	63.52
(1,298)	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	1:A:39:TYR:CD1	13	63.51
(1,298)	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	1:A:39:TYR:CD1	16	63.51
(1,199)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	9	63.49
(1,486)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	12	63.47
(1,298)	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	1:A:39:TYR:CD1	5	63.46
(1,479)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	2	63.44
(1,185)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	18	63.44
(1,492)	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	1:A:102:TYR:CD1	19	63.41
(1,597)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	19	63.4
(1,577)	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	1:A:133:GLU:CD	9	63.4
(1,401)	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	1:A:69:PHE:CD1	1	63.39
(1,400)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	17	63.37
(1,570)	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	1:A:130:GLU:CD	17	63.34
(1,543)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	14	63.34
(1,632)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	18	63.31
(1,672)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	13	63.26
(1,507)	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	1:A:106:TYR:CD1	1	63.26
(1,380)	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	1:A:62:PHE:CD1	11	63.25
(1,313)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	12	63.22
(1,323)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	15	63.18
(1,313)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	11	63.18
(1,446)	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	1:A:83:GLY:CA	1:A:83:GLY:C	15	63.17
(1,376)	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	1:A:61:TYR:CD1	16	63.15
(1,587)	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	1:A:135:TYR:CD1	11	63.13
(1,384)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	10	63.12
(1,304) $(1,400)$	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	2	63.08
(1,400) $(1,274)$	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	5	63.07
(1,414)	1.A.30.GLU:N	I.A.JU.GLU.CA	1.A.50.GLU.OD	1.A.50.GLU:CG		03.07



	ed from previous pag Atom-1	Atom-2	Atom 2	Atom 1	Model	Violetien (a)
Key			Atom-3	Atom-4		Violation (o)
(1,226)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	18	63.02
(1,202)	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	1:A:7:PHE:CD1	20	63.01
(1,416)	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	1:A:73:PHE:CD1	13	62.99
(1,214)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	17	62.96
(1,210)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	11	62.94
(1,201)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	17	62.93
(1,439)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	15	62.9
(1,421)	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	1:A:75:PHE:CD1	13	62.86
(1,199)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	17	62.86
(1,469)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	15	62.85
(1,657)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	4	62.82
(1,316)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	9	62.79
(1,369)	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	1:A:58:PHE:CD1	2	62.76
(1,599)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:CB	1:A:137:ASP:CG	16	62.74
(1,173)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	2	62.74
(1,630)	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:CB	1:A:145:ASP:CG	16	62.72
(1,272)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	7	62.71
(1,644)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	1:A:148:ARG:N	13	62.68
(1,244)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	12	62.68
(1,569)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	15	62.66
(1,244)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	2	62.66
(1,202)	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	1:A:7:PHE:CD1	8	62.61
(1,642)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	2	62.57
(1,202)	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	1:A:7:PHE:CD1	2	62.53
(1,366)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	11	62.46
(1,587)	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	1:A:135:TYR:CD1	7	62.45
(1,290)	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	1:A:35:PHE:CD1	7	62.45
(1,484)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	12	62.43
(1,240)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	14	62.42
(1,503)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	12	62.39
(1,409)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	2	62.31
(1,486)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	5	62.29
(1,369)	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	1:A:58:PHE:CD1	13	62.29
(1,585)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	8	62.23
(1,313)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	2	62.23
(1,170)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	14	62.23
(1,656)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	18	62.21
(1,584)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	20	62.19
(1,298)	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	1:A:39:TYR:CD1	9	62.19
(1,388)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	12	62.12
(1,233)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	1	62.08
(1,584)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	10	62.04
(1,313)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	15	62.0
(1,673)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	15	61.95
(1,558)	1:A:126:ASP:N	1:A:126:ASP:CA	1:A:126:ASP:CB	1:A:126:ASP:CG	7	61.91
(1,357)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	3	61.9
(1,485)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	6	61.89
(1,468)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	8	61.86
(1,213)	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	1:A:10:GLU:CD	8	61.85
(1,487)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	10	61.82
(1,662)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	13	61.79



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,444)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	8	61.79
(1,401)	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	1:A:69:PHE:CD1	10	61.76
(1,202)	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	1:A:7:PHE:CD1	10	61.62
(1,627)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	7	61.59
(1,573)	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	1:A:132:TYR:CD1	10	61.59
(1,492)	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	1:A:102:TYR:CD1	12	61.57
(1,389)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	9	61.57
(1,320)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	18	61.52
(1,463)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	10	61.49
(1,202)	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	1:A:7:PHE:CD1	6	61.49
(1,556)	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	1:A:125:PHE:CD1	10	61.47
(1,281)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	12	61.45
(1,244)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	20	61.44
(1,583)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	5	61.42
(1,479)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	20	61.42
(1,324)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	4	61.42
(1,177)	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	1:A:3:PHE:CD1	14	61.41
(1,376)	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	1:A:61:TYR:CD1	17	61.4
(1,314)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	2	61.4
(1,325)	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	1:A:44:GLN:CD	16	61.39
(1,325) $(1,245)$	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	13	61.39
(1,249) $(1,289)$	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	7	61.38
(1,233) $(1,226)$	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	14	61.37
(1,220) $(1,573)$	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	1:A:132:TYR:CD1	20	61.36
(1,373) $(1,380)$	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	1:A:62:PHE:CD1	14	61.36
(/ /	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:02:FHE:CD1 1:A:119:TRP:CG		
(1,542)					19	61.32
(1,451)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	1	61.3
(1,531)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	8	61.26
(1,656)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	20	61.24
(1,272)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	2	61.23
(1,482)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	10	61.22
(1,482)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	17	61.22
(1,220)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	12	61.22
(1,577)	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	1:A:133:GLU:CD	14	61.21
(1,395)	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	2	61.21
(1,369)	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	1:A:58:PHE:CD1	7	61.18
(1,350)	1:A:49:GLN:C	1:A:50:GLY:N	1:A:50:GLY:CA	1:A:50:GLY:C	10	61.18
(1,281)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	1	61.17
(1,192)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	19	61.15
(1,668)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	6	61.12
(1,583)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	11	61.11
(1,416)	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	1:A:73:PHE:CD1	12	61.11
(1,485)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	19	61.1
(1,641)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	20	61.08
(1,416)	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	1:A:73:PHE:CD1	9	61.06
(1,640)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	18	61.05
(1,492)	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	1:A:102:TYR:CD1	16	61.05
(1,443)	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	1:A:82:GLU:CD	10	61.05
(1,204)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	1:A:8:VAL:N	7	61.05
(1,636)	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	1:A:146:GLN:CD	5	60.99
(1,344)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	10	60.98
(+,=++)	121	1.11.21.22		1.11.21.22		od on nort nago



	ed from previous pag		A		7.6 1 1	T 7* 1 .
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,376)	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	1:A:61:TYR:CD1	5	60.97
(1,350)	1:A:49:GLN:C	1:A:50:GLY:N	1:A:50:GLY:CA	1:A:50:GLY:C	6	60.97
(1,413)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:PHE:N	18	60.95
(1,313)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	14	60.95
(1,376)	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	1:A:61:TYR:CD1	20	60.94
(1,357)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	12	60.94
(1,284)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	19	60.94
(1,214)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	7	60.94
(1,633)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	3	60.93
(1,472)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	10	60.91
(1,433)	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	1:A:79:GLY:CA	1:A:79:GLY:C	6	60.91
(1,231)	1:A:16:PRO:N	1:A:16:PRO:CA	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	2	60.88
(1,179)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	14	60.87
(1,632)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	10	60.81
(1,268)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	12	60.81
(1,416)	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	1:A:73:PHE:CD1	3	60.76
(1,233)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	12	60.75
(1,376)	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	1:A:61:TYR:CD1	8	60.7
(1,357)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	2	60.7
(1,202)	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	1:A:7:PHE:CD1	15	60.7
(1,587)	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	1:A:135:TYR:CD1	10	60.67
(1,171)	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:CB	1:A:2:ASP:CG	4	60.64
(1,684)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	2	60.62
(1,423)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	3	60.62
(1,644)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	1:A:148:ARG:N	12	60.61
(1,416)	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	1:A:73:PHE:CD1	20	60.56
(1,669)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	15	60.54
(1,484)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	11	60.54
(1,288)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	2	60.54
(1,421)	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	1:A:75:PHE:CD1	15	60.53
(1,409)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	8	60.53
(1,376)	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	1:A:61:TYR:CD1	7	60.53
(1,439)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	17	60.51
(1,383)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	4	60.51
(1,401)	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	1:A:69:PHE:CD1	7	60.49
(1,332)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	19	60.49
(1,164)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	15	60.49
(1,656)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	5	60.48
(1,556)	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	1:A:125:PHE:CD1	8	60.48
(1,507)	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	1:A:106:TYR:CD1	18	60.47
(1,268)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	2	60.46
(1,441)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	2	60.44
(1,677)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	7	60.43
(1,592)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	11	60.43
(1,617)	1:A:141:GLU:C	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	15	60.42
(1,409)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	11	60.42
(1,617)	1:A:141:GLU:C	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	10	60.4
(1,303)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	12	60.39
(1,199)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	8	60.38
(1,308)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	12	60.35
\ ,/	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	3	60.33



	ed from previous pag		A	A	3.6 1.1	T 7* 1 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,350)	1:A:49:GLN:C	1:A:50:GLY:N	1:A:50:GLY:CA	1:A:50:GLY:C	16	60.32
(1,469)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	2	60.3
(1,668)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	8	60.29
(1,440)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	9	60.28
(1,272)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	6	60.22
(1,332)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	6	60.18
(1,532)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	10	60.12
(1,528)	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	1:A:113:TYR:CD1	4	60.08
(1,443)	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	1:A:82:GLU:CD	14	60.06
(1,421)	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	1:A:75:PHE:CD1	14	60.06
(1,528)	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	1:A:113:TYR:CD1	3	60.05
(1,170)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	12	60.05
(1,469)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	17	60.02
(1,492)	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	1:A:102:TYR:CD1	18	59.99
(1,587)	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	1:A:135:TYR:CD1	12	59.98
(1,376)	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	1:A:61:TYR:CD1	12	59.94
(1,241)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	11	59.94
(1,592)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	12	59.9
(1,570)	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	1:A:130:GLU:CD	1	59.89
(1,596)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	17	59.87
(1,492)	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	1:A:102:TYR:CD1	11	59.85
(1,350)	1:A:49:GLN:C	1:A:50:GLY:N	1:A:50:GLY:CA	1:A:50:GLY:C	14	59.83
(1,376)	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	1:A:61:TYR:CD1	14	59.82
(1,221)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	1	59.81
(1,201)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	11	59.8
(1,233)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	6	59.79
(1,290)	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	1:A:35:PHE:CD1	8	59.77
(1,528)	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	1:A:113:TYR:CD1	5	59.75
(1,592)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	13	59.7
(1,366)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	1	59.68
(1,528)	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	1:A:113:TYR:CD1	16	59.67
(1,394)	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	16	59.65
(1,357)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	13	59.62
(1,484)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	18	59.6
(1,592)	1:A:136:LEU:N		1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	8	59.59
(1,503)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	19	59.58
(1,298)	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	1:A:39:TYR:CD1	14	59.57
(1,273)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	15	59.57
(1,570)	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	1:A:130:GLU:CD	14	59.5
(1,469)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	5	59.5
(1,430)	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	1:A:78:GLU:CD	15	59.49
(1,191)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	17	59.48
(1,492)	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	1:A:102:TYR:CD1	9	59.42
(1,514)	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	1:A:108:GLU:CD	5	59.4
(1,479)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	18	59.39
(1,467)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	13	59.39
(1,240)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	7	59.31
(1,390)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	20	59.28
(1,268)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	17	59.24
(1,668)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	4	59.19
(1,573)	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	1:A:132:TYR:CD1	8	59.19



	ed from previous pag		A 4 9	A + 4	N/L - 1 - 1	17:-1-4:
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,450)	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	1:A:85:GLY:CA	1:A:85:GLY:C	14	59.19
(1,633)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	13	59.18
(1,480)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	11	59.17
(1,369)	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	1:A:58:PHE:CD1	12	59.17
(1,573)	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	1:A:132:TYR:CD1	16	59.15
(1,298)	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	1:A:39:TYR:CD1	19	59.15
(1,284)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	13	59.14
(1,272)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	12	59.13
(1,559)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	7	59.11
(1,440)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	3	59.11
(1,552)	1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:CA	1:A:123:ASN:CB	1:A:123:ASN:CG	18	59.09
(1,298)	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	1:A:39:TYR:CD1	12	59.09
(1,592)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	5	59.07
(1,507)	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	1:A:106:TYR:CD1	17	59.07
(1,276)	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	1:A:30:GLU:CD	13	59.04
(1,259)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	5	59.01
(1,315)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	9	59.0
(1,357)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	4	58.99
(1,521)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	8	58.97
(1,627)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	16	58.95
(1,485)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	13	58.95
(1,445)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	18	58.94
(1,180)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	10	58.92
(1,640)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	15	58.91
(1,593)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	9	58.91
(1,232)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	13	58.91
(1,408)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	16	58.89
(1,470)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	8	58.78
(1,583)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	18	58.77
(1,344)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	6	58.77
(1,469)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	12	58.76
(1,202)	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	1:A:7:PHE:CD1	1	58.75
(1,382)	1:A:62:PHE:C	1:A:63:GLY:N	1:A:63:GLY:CA	1:A:63:GLY:C	3	58.71
(1,180)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	8	58.71
(1,393)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	8	58.7
(1,601)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	4	58.69
(1,552)	1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:CA	1:A:123:ASN:CB	1:A:123:ASN:CG	17	58.69
(1,259)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	6	58.68
(1,240)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	2	58.67
(1,202)	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	1:A:7:PHE:CD1	11	58.66
(1,598)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	8	58.65
(1,484)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	5	58.65
(1,434)	1:A:79:GLY:C	1:A:80:GLY:N	1:A:80:GLY:CA	1:A:80:GLY:C	12	58.63
(1,559)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1	58.62
(1,232)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	5	58.62
(1,215)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	11	58.59
(1,552)	1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:CA	1:A:123:ASN:CB	1:A:123:ASN:CG	4	58.58
(1,323)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	3	58.58
(1,668)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	10	58.55
(1,603)	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:CB	1:A:138:ASN:CG	4	58.55
· · /		1:A:4:GLU:CB				58.55
(1,184)	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	1:A:4:GLU:CD	8	58.55



Atom-1 1:A:70:GLU:CA	Atom-2 1:A:70:GLU:CB	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
1:A:70:GLU:CA	1. A . 70. CT H. CB				
		1:A:70:GLU:CG	1:A:70:GLU:CD	3	58.54
1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	10	58.53
					58.5
					58.48
					58.41
					58.39
					58.37
					58.35
				14	58.32
				4	58.32
					58.31
					58.21
					58.2
					58.18
	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	19	58.17
1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	1:A:113:TYR:CD1	14	58.17
1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	9	58.16
1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	19	58.16
1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	11	58.12
1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	14	58.11
1:A:79:GLY:C	1:A:80:GLY:N	1:A:80:GLY:CA	1:A:80:GLY:C	2	58.11
1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	1:A:58:PHE:CD1	1	58.09
1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	13	58.09
1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:CB	1:A:2:ASP:CG	15	58.07
1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	13	58.06
1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	8	57.99
1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	9	57.98
1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	3	57.94
1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	7	57.93
1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	4	57.93
1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	1	57.91
1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	1:A:13:GLU:CD	11	57.89
1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	1:A:102:TYR:CD1	17	57.86
1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	12	57.85
1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	17	57.84
1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	1:A:125:PHE:CD1	12	57.78
1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	19	57.76
1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	17	57.75
1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	19	57.75
1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:PHE:N	14	57.75
1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	1:A:62:PHE:CD1	13	57.75
1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	1:A:73:PHE:CD1	18	57.74
1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	5	57.71
1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:CB	1:A:145:ASP:CG	3	57.68
1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	20	57.66
1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	17	57.65
1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	9	57.64
1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	1:A:106:TYR:CD1	16	57.64
1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	3	57.64
1.A.1.ME1.0	1.11.2.1101 .11				
1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	9	57.62
	1:A:40:HIS:C 1:A:7:PHE:CA 1:A:106:TYR:CA 1:A:69:PHE:CA 1:A:144:PRO:N 1:A:144:PRO:N 1:A:31:LEU:N 1:A:21:LEU:N 1:A:61:TYR:CA 1:A:90:GLY:N 1:A:71:VAL:C 1:A:132:TYR:N 1:A:132:TYR:N 1:A:137:ASP:N 1:A:156:HIS:N 1:A:79:GLY:C 1:A:30:GLU:N 1:A:31:LEU:N 1:A:31:LEU:N 1:A:144:PRO:N 1:A:156:HIS:N 1:A:79:GLY:C 1:A:30:GLU:N 1:A:14:ASP:N 1:A:144:PRO:N 1:A:144:PRO:N 1:A:144:PRO:N 1:A:155:LEU:N 1:A:13:GLU:C 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:CA 1:A:155:LEU:N 1:A:155:LEU:N 1:A:155:LEU:N 1:A:153:LEU:N	1:A:40:HIS:C 1:A:7:PHE:CB 1:A:7:PHE:CB 1:A:7:PHE:CB 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:CB 1:A:69:PHE:CB 1:A:69:PHE:CB 1:A:21:LEU:N 1:A:21:LEU:CA 1:A:144:PRO:N 1:A:102:TYR:CB 1:A:31:LEU:N 1:A:31:LEU:CA 1:A:21:LEU:N 1:A:31:LEU:CA 1:A:21:LEU:N 1:A:61:TYR:CB 1:A:90:GLY:N 1:A:90:GLY:CA 1:A:132:TYR:N 1:A:132:TYR:CA 1:A:90:GLY:N 1:A:90:GLY:CA 1:A:90:GLY:N 1:A:80:GLY:N 1:A:137:ASP:N 1:A:137:ASP:CA 1:A:156:HIS:N 1:A:156:HIS:CA 1:A:79:GLY:C 1:A:80:GLY:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:80:GLY:N 1:A:30:GLU:N 1:A:230:GLU:CA 1:A:14:PRO:N 1:A:144:PRO:CA 1:A:144:PRO:N 1:A:144:PRO:CA 1:A:40:PHE:N 1:A:108:GLU:N 1:A:4:GLU:C 1:A:108:GLU:N 1:A:4:GLU:C 1:A:108:GLU:N 1:A:114:ASP:N 1:A:114:ASP:CA 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:CB 1:A:15:EU:	1:A:40:HIS:C 1:A:41:ASP:N 1:A:41:ASP:CA 1:A:7:PHE:CA 1:A:7:PHE:CB 1:A:7:PHE:CG 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:CB 1:A:106:TYR:CG 1:A:69:PHE:CA 1:A:106:TYR:CB 1:A:106:TYR:CG 1:A:21:LEU:N 1:A:21:LEU:CA 1:A:21:LEU:CB 1:A:144:PRO:C 1:A:102:TYR:CG 1:A:102:TYR:CG 1:A:31:LEU:N 1:A:31:LEU:CA 1:A:31:LEU:CB 1:A:61:TYR:CA 1:A:61:TYR:CB 1:A:61:TYR:CG 1:A:90:GLY:N 1:A:90:GLY:CA 1:A:90:GLY:C 1:A:71:VAL:C 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:N 1:A:71:VAL:C 1:A:732:TYR:CB 1:A:113:TYR:CG 1:A:90:GLY:N 1:A:90:GLY:CA 1:A:90:GLY:C 1:A:13:TYR:CA 1:A:13:TYR:CB 1:A:13:TYR:CB 1:A:13:TYR:CA 1:A:13:TYR:CB 1:A:13:TYR:CB 1:A:45:EU:N 1:A:45:GLU:N 1:A:89:GLY:C 1:A:31:ASP:N 1:A:13:TASP:CA 1:A:137:ASP:C 1:A:14:ASP:N 1:A:14:SE:GLU:N 1:A:156:HIS:C 1:A:79:GLY:C 1:A:80:GLY:N 1:A:36:GLY:CA 1:A:25:HIE:CA	1:A:40:HIS:C	1:A:40:HIS:C



	ed from previous pag				36 11	T71 1 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,395)	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	9	57.58
(1,244)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	3	57.57
(1,416)	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	1:A:73:PHE:CD1	6	57.49
(1,457)	1:A:86:ARG:C	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:C	9	57.45
(1,191)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	13	57.45
(1,587)	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	1:A:135:TYR:CD1	9	57.44
(1,415)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	20	57.39
(1,409)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	9	57.39
(1,507)	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	1:A:106:TYR:CD1	6	57.38
(1,214)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	20	57.37
(1,295)	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	1:A:36:GLU:CD	18	57.34
(1,304)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:CB	1:A:41:ASP:CG	12	57.33
(1,423)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	9	57.31
(1,394)	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	18	57.31
(1,302)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	11	57.29
(1,564)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	16	57.26
(1,177)	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	1:A:3:PHE:CD1	20	57.26
(1,409)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	19	57.25
(1,560)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	2	57.23
(1,440)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	18	57.22
(1,386)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	16	57.21
(1,656)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	11	57.18
(1,285)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	2	57.18
(1,320)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	13	57.15
(1,668)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	2	57.14
(1,559)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	11	57.14
(1,486)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	4	57.14
(1,415)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	3	57.14
(1,632)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	4	57.13
(1,214)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	9	57.13
(1,528)	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	1:A:113:TYR:CD1	17	57.12
(1,168)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	5	57.08
(1,429)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	13	57.04
(1,285)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	6	57.04
(1,640)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	6	57.03
(1,380)	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	1:A:62:PHE:CD1	16	57.02
(1,226)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	6	57.02
(1,528)	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	1:A:113:TYR:CD1	8	57.01
(1,186)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	8	57.01
(1,405)	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	1:A:70:GLU:CD	6	57.0
(1,376)	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	1:A:61:TYR:CD1	11	57.0
(1,584)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	14	56.99
(1,665)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	20	56.95
(1,352)	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	13	56.95
(1,268)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	8	56.95
(1,313)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	3	56.9
(1,571)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	13	56.87
(1,665)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1	56.85
(1,369)	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	1:A:58:PHE:CD1	14	56.85
(1,635)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	19	56.83
(1,190)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	12	56.8



	ed from previous pag		A		36 11	T71 1 14 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,532)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	17	56.79
(1,180)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	15	56.79
(1,423)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	1	56.78
(1,305)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	18	56.78
(1,304)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:CB	1:A:41:ASP:CG	9	56.78
(1,630)	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:CB	1:A:145:ASP:CG	1	56.76
(1,298)	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	1:A:39:TYR:CD1	11	56.76
(1,376)	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	1:A:61:TYR:CD1	6	56.75
(1,376)	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	1:A:61:TYR:CD1	9	56.75
(1,288)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	3	56.72
(1,673)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	8	56.71
(1,656)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	3	56.7
(1,397)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	12	56.64
(1,393)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	11	56.64
(1,202)	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	1:A:7:PHE:CD1	3	56.63
(1,541)	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	1:A:118:LYS:CD	15	56.62
(1,254)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	7	56.62
(1,245)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	11	56.6
(1,369)	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	1:A:58:PHE:CD1	4	56.57
(1,226)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	7	56.55
(1,416)	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	1:A:73:PHE:CD1	4	56.54
(1,244)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	18	56.54
(1,390)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	5	56.5
(1,273)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	8	56.5
(1,640)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	3	56.48
(1,260)	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	1:A:25:GLN:CD	19	56.41
(1,514)	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	1:A:108:GLU:CD	10	56.39
(1,199)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	5	56.37
(1,646)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	11	56.32
(1,169)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	7	56.32
(1,532)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	12	56.28
(1,376)	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	1:A:61:TYR:CD1	4	56.28
(1,484)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	10	56.27
(1,409)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	4	56.26
(1,201)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	15	56.23
(1,662)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	8	56.22
(1,597)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	2	56.22
(1,487)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	11	56.21
(1,481)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	16	56.21
(1,442)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	5	56.21
(1,317)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	3	56.2
(1,416)	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	1:A:73:PHE:CD1	17	56.19
(1,214)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	5	56.17
(1,416)	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	1:A:73:PHE:CD1	11	56.15
(1,482)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	7	56.06
(1,255)	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	1:A:23:ARG:CD	12	56.06
(1,295)	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	1:A:36:GLU:CD	13	56.04
(1,288)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	9	56.04
(1,401)	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	1:A:69:PHE:CD1	8	56.02
(1,449)	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	20	56.0
(1,433)	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	1:A:79:GLY:CA	1:A:79:GLY:C	12	55.98



	ed from previous pag	e Atom-2	A 4 2	A + 4	N/L - 1 - 1	17:-1-4: (-)
Key	Atom-1		Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,632)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	16	55.96
(1,684)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	5	55.95
(1,444)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	5	55.93
(1,552)	1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:CA	1:A:123:ASN:CB	1:A:123:ASN:CG	12	55.92
(1,447)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	8	55.91
(1,449)	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	1	55.89
(1,260)	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	1:A:25:GLN:CD	9	55.87
(1,469)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	7	55.86
(1,647)	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	1:A:148:ARG:CD	4	55.76
(1,441)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	14	55.76
(1,421)	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	1:A:75:PHE:CD1	1	55.76
(1,226)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	20	55.74
(1,440)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	8	55.73
(1,288)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	17	55.72
(1,202)	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	1:A:7:PHE:CD1	19	55.7
(1,601)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	17	55.68
(1,304)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:CB	1:A:41:ASP:CG	5	55.68
(1,510)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	12	55.64
(1,507)	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	1:A:106:TYR:CD1	14	55.64
(1,331)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	2	55.61
(1,307)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1	55.6
(1,213)	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	1:A:10:GLU:CD	6	55.59
(1,369)	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	1:A:58:PHE:CD1	10	55.57
(1,479)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	4	55.55
(1,415)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	9	55.55
(1,641)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	11	55.54
(1,600)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	17	55.54
(1,507)	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	1:A:106:TYR:CD1	10	55.54
(1,443)	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	1:A:82:GLU:CD	6	55.54
(1,204)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	1:A:8:VAL:N	4	55.54
(1,375)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	17	55.51
(1,185)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	7	55.51
(1,573)	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	1:A:132:TYR:CD1	7	55.5
(1,447)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	16	55.5
(1,171)	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:CB	1:A:2:ASP:CG	13	55.5
(1,380)	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	1:A:62:PHE:CD1	4	55.48
(1,668)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	13	55.44
(1,592)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	4	55.43
(1,423)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	4	55.38
(1,425) $(1,295)$	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	1:A:36:GLU:CD	14	55.37
(1,634)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	5	55.3
(1,094) $(1,191)$	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	3	55.29
(1,191) $(1,440)$	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1	55.27
(1,380)	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:GLU:N 1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	1:A:62:PHE:CD1	7	55.25
(1,369)	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	1:A:58:PHE:CD1	8	55.25
(1,509) $(1,577)$	1:A:133:GLU:CA	1:A:33:GLU:CB	1:A:33:GLU:CG	1:A:33:GLU:CD	18	55.24
$\frac{(1,577)}{(1,570)}$	1:A:130:GLU:CA 1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	1:A:130:GLU:CD	13	55.24
· · /	1:A:5:CYS:C	1:A:150:GLU:CB 1:A:6:GLN:N	1:A:150:GLU:CG 1:A:6:GLN:CA	1:A:150:GLU:CD	16	55.24
(1,191)					3	
(1,421)	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	1:A:75:PHE:CD1		55.23
(1,313)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	5	55.2
(1,578)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	6	55.18



	ed from previous pag			.	36 11	T70 1 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,329)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	2	55.17
(1,531)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	5	55.16
(1,304)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:CB	1:A:41:ASP:CG	18	55.15
(1,449)	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	18	55.13
(1,430)	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	1:A:78:GLU:CD	13	55.1
(1,641)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	2	55.09
(1,421)	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	1:A:75:PHE:CD1	4	55.09
(1,390)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	15	55.09
(1,244)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	15	55.09
(1,634)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	1	55.07
(1,369)	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	1:A:58:PHE:CD1	5	55.06
(1,468)	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	12	55.02
(1,224)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	15	55.02
(1,532)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1	55.01
(1,389)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	11	55.0
(1,302)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	18	55.0
(1,615)	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	1:A:141:GLU:CD	7	54.97
(1,372)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	1	54.93
(1,430)	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	1:A:78:GLU:CD	18	54.91
(1,598)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	12	54.88
(1,585)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	18	54.86
(1,305)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	7	54.86
(1,568)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	14	54.85
(1,444)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	16	54.81
(1,348)	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	1:A:49:GLN:CD	14	54.76
(1,180)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	1	54.76
(1,323)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	18	54.74
(1,210)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	6	54.73
(1,395)	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	13	54.71
(1,369)	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	1:A:58:PHE:CD1	19	54.71
(1,556)	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	1:A:125:PHE:CD1	16	54.65
(1,401)	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	1:A:69:PHE:CD1	15	54.65
(1,522)	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	1:A:110:GLU:CD	1	54.63
(1,184)	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	1:A:4:GLU:CD	3	54.62
(1,583)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	2	54.61
(1,214)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	12	54.61
(1,177)	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	1:A:3:PHE:CD1	3	54.6
(1,573)	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	1:A:132:TYR:CD1	14	54.58
(1,376)	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	1:A:61:TYR:CD1	19	54.55
(1,298)	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	1:A:39:TYR:CD1	4	54.55
(1,401)	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	1:A:69:PHE:CD1	9	54.53
(1,566)	1:A:128:SER:C	1:A:129:GLY:N	1:A:129:GLY:CA	1:A:129:GLY:C	6	54.52
(1,416)	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	1:A:73:PHE:CD1	10	54.52
(1,615)	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	1:A:141:GLU:CD	6	54.51
(1,484)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	7	54.51
(1,298)	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	1:A:39:TYR:CD1	2	54.48
(1,601)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	1	54.47
(1,541)	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	1:A:118:LYS:CD	9	54.47
(1,541) $(1,554)$	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	10	54.43
(1,334) $(1,334)$	1:A:45:LEU:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	16	54.43
(1,554) $(1,556)$	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	1:A:125:PHE:CD1	3	54.42
(1,000)	1.71.120.1 HE.OA	1.71.120.1 HE.OD	1.11.120.1 110.00	1.71.120.1 111.011		od on mont man



	ed from previous pag				3.5.1.1	T7. 1 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,285)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	3	54.42
(1,243)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	4	54.41
(1,179)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	16	54.39
(1,522)	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	1:A:110:GLU:CD	4	54.32
(1,440)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	10	54.32
(1,541)	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	1:A:118:LYS:CD	13	54.31
(1,210)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	13	54.29
(1,573)	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	1:A:132:TYR:CD1	4	54.22
(1,660)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	8	54.2
(1,220)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	5	54.18
(1,506)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	19	54.17
(1,295)	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	1:A:36:GLU:CD	12	54.17
(1,592)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	19	54.13
(1,290)	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	1:A:35:PHE:CD1	2	54.13
(1,313)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	13	54.12
(1,274)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	18	54.1
(1,409)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	17	54.09
(1,586)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	17	54.08
(1,575)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	1	54.08
(1,430)	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	1:A:78:GLU:CD	12	54.08
(1,255)	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	1:A:23:ARG:CD	19	54.08
(1,640)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	16	54.06
(1,348)	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	1:A:49:GLN:CD	15	54.04
(1,528)	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	1:A:113:TYR:CD1	18	54.03
(1,444)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	1	54.02
(1,676)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	3	53.98
(1,430)	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	1:A:78:GLU:CD	2	53.97
(1,430)	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	1:A:78:GLU:CD	7	53.94
(1,486)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	20	53.93
(1,492)	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	1:A:102:TYR:CD1	1	53.92
(1,423)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	10	53.91
(1,320)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	5	53.87
(1,510)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	5	53.85
(1,210)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	12	53.85
(1,421)	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	1:A:75:PHE:CD1	6	53.84
(1,672)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	10	53.83
(1,401)	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	1:A:69:PHE:CD1	13	53.82
(1,454)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	18	53.81
(1,507)	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	1:A:106:TYR:CD1	3	53.8
(1,195)	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	1:A:6:GLN:CD	18	53.8
(1,482)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	5	53.79
(1,279)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	8	53.79
(1,316)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	2	53.78
(1,666)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	5	53.77
(1,376)	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	1:A:61:TYR:CD1	2	53.77
(1,295)	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	1:A:36:GLU:CD	3	53.75
(1,233) $(1,423)$	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	17	53.74
(1,125) $(1,285)$	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	11	53.72
(1,344)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	15	53.71
(1,344) $(1,423)$	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	12	53.7
(1,423) $(1,401)$	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	1:A:69:PHE:CD1	16	53.7
(1,401)	1.11.09.1 11E.OA	1.71.09.1 111.01	1.71.09.1 1111.00	1.71.09.1 1112.001		od on nort nage



Key	$egin{array}{c} ed \ from \ previous \ pag \ \hline oldsymbol{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,295)	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	1:A:36:GLU:CD	20	53.7
(1,421)	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	1:A:75:PHE:CD1	20	53.69
(1,421) $(1,244)$	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	9	53.69
(1,244) $(1,615)$	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	1:A:141:GLU:CD	18	53.68
(1,334)	1:A:45:LEU:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	20	53.68
(1,331) $(1,426)$	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1	53.67
(1,479)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	16	53.65
(1,423)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	2	53.62
(1,492)	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	1:A:102:TYR:CD1	20	53.61
(1,421)	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	1:A:75:PHE:CD1	7	53.61
(1,366)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	6	53.6
(1,168)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	16	53.6
(1,401)	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	1:A:69:PHE:CD1	14	53.58
(1,179)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	2	53.56
(1,487)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	2	53.52
(1,437) $(1,244)$	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	7	53.52
(1,177)	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	1:A:3:PHE:CD1	15	53.52
(1,632)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	6	53.51
(1,632) $(1,630)$	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:CB	1:A:145:ASP:CG	11	53.47
(1,030) $(1,171)$	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:CB	1:A:2:ASP:CG	20	53.43
(1,171) $(1,457)$	1:A:86:ARG:C	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:C	6	53.4
(1,437) $(1,179)$	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	20	53.38
(1,179) $(1,571)$	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	7	53.34
(1,571) $(1,587)$	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	1:A:135:TYR:CD1	17	53.31
(1,337) $(1,421)$	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	1:A:75:PHE:CD1	11	53.3
(1,373)	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	1:A:60:ARG:CD	2	53.3
(1,563)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	20	53.27
(1,309) $(1,239)$	1:A:18:PRO:N	1:A:18:PRO:CA	1:A:18:PRO:C	1:A:19:ALA:N	9	53.24
(1,527)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	20	53.23
(1,184)	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	1:A:4:GLU:CD	18	53.23
(1,104) $(1,409)$	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1	53.18
(1,400) $(1,400)$	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	16	53.15
(1,380)	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	1:A:62:PHE:CD1	2	53.14
(1,350) $(1,350)$	1:A:49:GLN:C	1:A:50:GLY:N	1:A:50:GLY:CA	1:A:50:GLY:C	13	53.14
(1,330) $(1,423)$	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	8	53.11
(1,423) $(1,261)$	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	1	53.1
(1,201) $(1,561)$	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	3	53.05
(1,301) $(1,416)$	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	1:A:73:PHE:CD1	7	53.04
(1,410) $(1,185)$	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	12	53.04
(1,168) $(1,168)$	1:A:4:GLU:N 1:A:1:MET:N	1:A:4:GLU:CA 1:A:1:MET:CA	1:A:4:GLU:C 1:A:1:MET:C	1:A:5:C 15:N 1:A:2:ASP:N	15	53.04
(1,108) $(1,504)$	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:2:ASF:N 1:A:106:TYR:N	15	53.03
(1,304) $(1,195)$	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	1:A:6:GLN:CD	19	52.99
(1,193) $(1,572)$	1:A:0:GLN:CA 1:A:132:TYR:N	1:A:0:GLN:CB 1:A:132:TYR:CA	1:A:0:GLN:CG 1:A:132:TYR:CB	1:A:0:GLN:CD 1:A:132:TYR:CG	18	52.99
$\frac{(1,372)}{(1,316)}$	1:A:132:1 Y R:N 1:A:43:LEU:N	1:A:132:1 Y R:CA 1:A:43:LEU:CA	1:A:132:1 YR:CB 1:A:43:LEU:CB	1:A:132:1 YR:CG 1:A:43:LEU:CG	15	52.98
(1,310) $(1,492)$	1:A:45:LEU:N 1:A:102:TYR:CA	1:A:43:LEU:CA 1:A:102:TYR:CB	1:A:43:LEU:CB 1:A:102:TYR:CG	1:A:43:LEU:CG 1:A:102:TYR:CD1	13	52.95
· · /	1:A:102:1 1 K:CA 1:A:132:TYR:CA	1:A:102:1 FR:CB 1:A:132:TYR:CB	1:A:102:14 R:CG 1:A:132:TYR:CG	1:A:102:1 1 K:CD1 1:A:132:TYR:CD1	3	52.95
(1,573)	1:A:78:GLU:CA	1:A:132:1 YR:CB 1:A:78:GLU:CB	1:A:132:1 YR:CG 1:A:78:GLU:CG	1:A:78:GLU:CD	9	52.94
(1,430)	1:A:78:GLU:CA 1:A:5:CYS:C	1:A:78:GLU:CB 1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLU:CG 1:A:6:GLN:CA	1:A:78:GLU:CD 1:A:6:GLN:C		52.92
(1,191)	1:A:5:C YS:C 1:A:133:GLU:N	1:A:0:GLN:N 1:A:133:GLU:CA	1:A:0:GLN:CA 1:A:133:GLU:CB	1:A:0:GLN:C 1:A:133:GLU:CG	5	52.92
(1,575)					6	
(1,488)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	20	52.91
(1,242)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	7	52.9



	ed from previous pag				36 11	T71 1 11
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,651)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	7	52.86
(1,531)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	9	52.86
(1,376)	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	1:A:61:TYR:CD1	13	52.86
(1,392)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	10	52.85
(1,492)	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	1:A:102:TYR:CD1	3	52.84
(1,185)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1	52.81
(1,556)	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	1:A:125:PHE:CD1	20	52.79
(1,245)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	4	52.79
(1,542)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	8	52.78
(1,549)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	3	52.77
(1,621)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	7	52.76
(1,401)	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	1:A:69:PHE:CD1	20	52.7
(1,630)	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:CB	1:A:145:ASP:CG	8	52.68
(1,279)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	11	52.68
(1,678)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	18	52.66
(1,611)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	6	52.66
(1,198)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	4	52.64
(1,191)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	12	52.64
(1,439)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	20	52.63
(1,220)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	11	52.63
(1,531)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	16	52.62
(1,657)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	15	52.6
(1,640)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	10	52.6
(1,232)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	15	52.59
(1,443)	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	1:A:82:GLU:CD	2	52.57
(1,382)	1:A:62:PHE:C	1:A:63:GLY:N	1:A:63:GLY:CA	1:A:63:GLY:C	17	52.55
(1,380)	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	1:A:62:PHE:CD1	20	52.52
(1,485)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	9	52.51
(1,558)	1:A:126:ASP:N	1:A:126:ASP:CA	1:A:126:ASP:CB	1:A:126:ASP:CG	8	52.47
(1,551)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	3	52.45
(1,611)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	13	52.44
(1,416)	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	1:A:73:PHE:CD1	2	52.44
(1,314)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	19	52.43
(1,614)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	3	52.4
(1,510)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	4	52.37
(1,169)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	1	52.36
(1,686)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	7	52.32
(1,676)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	20	52.28
(1,199)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	19	52.27
(1,286)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	10	52.26
(1,596)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	13	52.24
(1,423)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	15	52.23
(1,344)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	20	52.22
(1,531) $(1,531)$	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	10	52.21
(1,391) $(1,298)$	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	1:A:39:TYR:CD1	8	52.21
(1,244)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	16	52.2
(1,630)	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:CB	1:A:145:ASP:CG	5	52.19
(1,390) $(1,292)$	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	14	52.19
(1,632)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	8	52.18
(1,621)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	5	52.18
(1,301)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	18	52.16
(1,001)	1.11.40.1110.11	1.11.40.111D.OA	1.71.40.1110.00	1.71.40.1110.00		02.10



Key	$\frac{l\ from\ previous\ page}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,622)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	13	52.15
(1,214)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	14	52.12
(1,173)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	16	52.12
(1,281)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	7	52.11
(1,290)	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	1:A:35:PHE:CD1	18	52.09
(1,416)	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	1:A:73:PHE:CD1	14	52.06
(1,279)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	15	52.06
(1,407)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:CB	1:A:71:VAL:CG1	12	52.02
(1,583)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	13	52.0
· · /	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	1:A:132:TYR:CD1	1	51.97
(1,551)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	20	51.93
(1,636)	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	1:A:146:GLN:CD	19	51.92
(1,369)	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	1:A:58:PHE:CD1	18	51.92
(1,177)	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	1:A:3:PHE:CD1	17	51.92
(1,319)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	17	51.91
(1,632)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	2	51.89
(1,566)	1:A:128:SER:C	1:A:129:GLY:N	1:A:129:GLY:CA	1:A:129:GLY:C	9	51.87
(1,601)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	10	51.86
· · /	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	1:A:49:GLN:CD	11	51.81
· · /	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	11	51.81
(1,505)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	1	51.76
(1,171)	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:CB	1:A:2:ASP:CG	7	51.74
(1,380)	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	1:A:62:PHE:CD1	6	51.73
(1,393)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	15	51.71
(1,330)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	14	51.71
(1,484)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	20	51.7
· · /	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	1:A:82:GLU:CD	8	51.7
	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	1:A:78:GLU:CD	10	51.7
(1,260)	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	1:A:25:GLN:CD	2	51.69
(1,366)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	19	51.68
(1,666)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	17	51.66
(1,395)	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	12	51.66
(1,558)	1:A:126:ASP:N	1:A:126:ASP:CA	1:A:126:ASP:CB	1:A:126:ASP:CG	3	51.65
(1,233)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	9	51.65
(1,214)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	6	51.65
(1,630)	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:CB	1:A:145:ASP:CG	15	51.63
(1,214)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	16	51.62
(1,587)	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	1:A:135:TYR:CD1	8	51.61
(1,186)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	15	51.58
(1,677)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	4	51.56
(1,587)	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	1:A:135:TYR:CD1	4	51.54
(1,346)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	11	51.54
(1,244)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	14	51.54
(1,583)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	4	51.52
(1,348)	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	1:A:49:GLN:CD	4	51.52
(1,671)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	5	51.5
(1,656)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	9	51.48
(1,492)	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	1:A:102:TYR:CD1	2	51.47
(1,481)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	12	51.44
· (-;)			4 4 04 T DIT OD	1 4 01 1 111 00	10	F1 11
(1,279)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	18	51.44



	ed from previous pag				36 11	T71 1 14 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,344)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	13	51.43
(1,272)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	20	51.42
(1,558)	1:A:126:ASP:N	1:A:126:ASP:CA	1:A:126:ASP:CB	1:A:126:ASP:CG	11	51.38
(1,177)	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	1:A:3:PHE:CD1	5	51.37
(1,531)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	6	51.36
(1,450)	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	1:A:85:GLY:CA	1:A:85:GLY:C	8	51.35
(1,573)	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	1:A:132:TYR:CD1	17	51.34
(1,501)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	11	51.34
(1,317)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	6	51.34
(1,304)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:CB	1:A:41:ASP:CG	8	51.34
(1,268)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1	51.33
(1,598)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	11	51.32
(1,298)	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	1:A:39:TYR:CD1	3	51.3
(1,366)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	14	51.29
(1,272)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	19	51.27
(1,640)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	8	51.24
(1,583)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	12	51.23
(1,600)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	14	51.19
(1,573)	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	1:A:132:TYR:CD1	12	51.19
(1,486)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	3	51.19
(1,555)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	19	51.14
(1,382)	1:A:62:PHE:C	1:A:63:GLY:N	1:A:63:GLY:CA	1:A:63:GLY:C	15	51.13
(1,222)	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	1:A:12:LYS:CD	13	51.12
(1,215)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	1	51.1
(1,217)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	18	51.09
(1,587)	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	1:A:135:TYR:CD1	19	51.06
(1,685)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	20	51.04
(1,554)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	16	51.02
(1,394)	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	5	51.02
(1,401)	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	1:A:69:PHE:CD1	3	51.01
(1,657)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	19	51.0
(1,272)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	3	51.0
(1,501)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	19	50.99
(1,298)	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	1:A:39:TYR:CD1	17	50.99
(1,627)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	20	50.96
(1,400)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	14	50.95
(1,659)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	17	50.94
(1,288)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	16	50.93
(1,681)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	10	50.91
(1,501)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	15	50.91
(1,473)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	16	50.91
(1,627)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	15	50.87
(1,415)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	12	50.86
(1,298)	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	1:A:39:TYR:CD1	6	50.86
(1,549)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	18	50.85
(1,177)	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	1:A:3:PHE:CD1	7	50.85
(1,177) $(1,260)$	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	1:A:25:GLN:CD	1	50.83
(1,280) $(1,187)$	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	3	50.83
(1,137) $(1,371)$	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	3	50.81
(1,632)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	9	50.79
(1,032) $(1,558)$	1:A:126:ASP:N	1:A:140:GLN:N 1:A:126:ASP:CA	1:A:146:GLN:CA 1:A:126:ASP:CB	1:A:140:GLN:C 1:A:126:ASP:CG	12	50.79
(1,000)	1.A.120.ASF :N	1.A.120.ASF.OA	1.A.120.ASF.OD	1.A.120.ASF.CG		30.19



Key	$egin{array}{c} ext{ed from previous pag} \ ext{ } ext{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,332)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	12	50.79
(1,526)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	12	50.77
(1,479)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	6	50.75
(1,288)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	6	50.75
(1,320)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	17	50.71
(1,556)	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	1:A:125:PHE:CD1	17	50.7
(1,532)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	14	50.7
(1,421)	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	1:A:75:PHE:CD1	18	50.68
(1,305)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	6	50.67
(1,558)	1:A:126:ASP:N	1:A:126:ASP:CA	1:A:126:ASP:CB	1:A:126:ASP:CG	20	50.66
(1,483)	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	1:A:96:LYS:CD	17	50.63
(1,415)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	7	50.62
(1,401)	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	1:A:69:PHE:CD1	18	50.62
(1,202)	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	1:A:7:PHE:CD1	9	50.61
(1,346)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	4	50.6
(1,231)	1:A:16:PRO:N	1:A:16:PRO:CA	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	3	50.6
(1,423)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	16	50.57
(1,501)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	9	50.55
(1,231)	1:A:16:PRO:N	1:A:16:PRO:CA	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	9	50.5
(1,214)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	13	50.5
(1,288)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	1	50.46
(1,240)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	15	50.46
(1,669)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	5	50.45
(1,275)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	14	50.44
(1,330)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	5	50.42
(1,501)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	14	50.41
(1,313)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	19	50.41
(1,632)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	14	50.39
(1,501)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	16	50.39
(1,528)	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	1:A:113:TYR:CD1	13	50.36
(1,334)	1:A:45:LEU:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	6	50.36
(1,214)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	4	50.36
(1,288)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	13	50.35
(1,501)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	4	50.33
(1,180)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	18	50.32
(1,166)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	2	50.32
(1,434)	1:A:79:GLY:C	1:A:80:GLY:N	1:A:80:GLY:CA	1:A:80:GLY:C	13	50.31
(1,665)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	12	50.29
(1,638)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	4	50.29
(1,615)	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	1:A:141:GLU:CD	20	50.29
(1,186)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	16	50.29
(1,590)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	1	50.28
(1,180)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	4	50.28
(1,587)	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	1:A:135:TYR:CD1	1	50.26
(1,487)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	14	50.26
(1,528)	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	1:A:113:TYR:CD1	10	50.23
(1,526) $(1,506)$	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	15	50.22
(1,570)	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	1:A:130:GLU:CD	2	50.21
(1,563)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	17	50.15
(1,500) $(1,501)$	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	5	50.14
(1,501) $(1,501)$	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	20	50.14
(+,00+)	1.11.101.011111			1		ed on nert nage



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,506)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	11	50.09
(1,446)	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	1:A:83:GLY:CA	1:A:83:GLY:C	12	50.09
(1,379)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	19	50.08
(1,357)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	5	50.08
(1,572)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	8	50.07
(1,504)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	17	50.07
(1,573)	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	1:A:132:TYR:CD1	18	50.06
(1,298)	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	1:A:39:TYR:CD1	18	50.01
(1,344)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	1	50.0
(1,573)	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	1:A:132:TYR:CD1	13	49.99
(1,369)	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	1:A:58:PHE:CD1	16	49.98
(1,295)	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	1:A:36:GLU:CD	16	49.98
(1,413)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:PHE:N	10	49.96
(1,369)	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	1:A:58:PHE:CD1	9	49.94
(1,446)	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	1:A:83:GLY:CA	1:A:83:GLY:C	9	49.91
(1,531)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	2	49.9
(1,522)	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	1:A:110:GLU:CD	12	49.9
(1,254)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	10	49.89
(1,177)	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	1:A:3:PHE:CD1	6	49.89
(1,371)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	20	49.88
(1,202)	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	1:A:7:PHE:CD1	17	49.88
(1,506)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	17	49.87
(1,352)	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	2	49.85
(1,362) $(1,269)$	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	3	49.85
(1,217)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	9	49.84
(1,277) $(1,279)$	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	10	49.82
(1,273) $(1,272)$	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	9	49.81
(1,350)	1:A:49:GLN:C	1:A:50:GLU:N	1:A:50:GLY:CA	1:A:50:GLY:C	17	49.77
(1,630)	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:CB	1:A:145:ASP:CG	20	49.76
(1,558)	1:A:126:ASP:N	1:A:126:ASP:CA	1:A:126:ASP:CB	1:A:126:ASP:CG	1	49.76
· · /	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	1	49.76
(1,400)	1:A:09:PHE:N 1:A:101:LEU:N		1:A:09:PHE:CB			
(1,486)		1:A:101:LEU:CA		1:A:101:LEU:CG	15	49.75
(1,486)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	14	49.74
(1,421)	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	1:A:75:PHE:CD1	10	49.73
(1,385)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	10	49.73
(1,488)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	14	49.72
(1,184)	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	1:A:4:GLU:CD	20	49.71
(1,683)	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	1:A:157:GLU:CD	1	49.69
(1,308)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	17	49.6
(1,202)	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	1:A:7:PHE:CD1	16	49.6
(1,668)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1	49.57
(1,668)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	5	49.55
(1,593)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	3	49.55
(1,409)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	20	49.55
(1,241)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	15	49.54
(1,615)	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	1:A:141:GLU:CD	3	49.53
(1,226)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1	49.53
(1,595)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	4	49.52
(1,426)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	15	49.49
(1,357)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	17	49.49
(1,197)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	20	49.45
		1	1	1	Continu	ed on next page



	ed from previous pag		A 9	A .i 4	N.E. 1.1	T 7' . 1 . 4' ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,215)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	15	49.42
(1,486)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	17	49.41
(1,666)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1	49.38
(1,366)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	3	49.35
(1,210)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	8	49.33
(1,325)	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	1:A:44:GLN:CD	11	49.32
(1,305)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	4	49.3
(1,217)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	13	49.3
(1,357)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	18	49.29
(1,510)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	9	49.28
(1,421)	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	1:A:75:PHE:CD1	8	49.27
(1,215)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	19	49.24
(1,81)	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	4	49.22
(1,611)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	18	49.2
(1,522)	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	1:A:110:GLU:CD	8	49.2
(1,675)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	5	49.15
(1,350)	1:A:49:GLN:C	1:A:50:GLY:N	1:A:50:GLY:CA	1:A:50:GLY:C	7	49.15
(1,444)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	15	49.11
(1,346)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	8	49.09
(1,183)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	8	49.08
(1,656)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	10	49.07
(1,247)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	16	49.07
(1,389)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	17	49.06
(1,400)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	13	49.05
(1,177)	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	1:A:3:PHE:CD1	18	49.05
(1,566)	1:A:128:SER:C	1:A:129:GLY:N	1:A:129:GLY:CA	1:A:129:GLY:C	12	49.04
(1,296)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	20	49.04
(1,233)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	17	49.03
(1,388)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	16	49.02
(1,260)	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	1:A:25:GLN:CD	16	49.01
(1,656)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	19	49.0
(1,233)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	2	49.0
(1,260)	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	1:A:25:GLN:CD	5	48.98
(1,224)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	2	48.98
(1,527)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	4	48.94
(1,522)	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	1:A:110:GLU:CD	7	48.92
(1,443)	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	1:A:82:GLU:CD	19	48.91
(1,385)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	7	48.9
(1,627)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	12	48.89
(1,480)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	8	48.89
(1,440)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	5	48.89
(1,487)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	19	48.87
(1,372)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	19	48.87
(1,501)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	2	48.86
(1,325)	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	1:A:44:GLN:CD	2	48.86
(1,473)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	1	48.82
(1,177)	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	1:A:3:PHE:CD1	4	48.82
(1,457)	1:A:86:ARG:C	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:C	1	48.8
(1,330)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	17	48.79
(1,683)	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	1:A:157:GLU:CD	8	48.78
(1,444)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	20	48.76
(1,111)	1.11.02.010.11	1.71.02.010.011	1.11.02.010.0	1.11.05.GE1.11		40.10



Key	$egin{array}{c} ext{ed from previous pag} \ ext{ } ext{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,177)	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	1:A:3:PHE:CD1	13	48.76
(1,241)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	20	48.75
(1,556)	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	1:A:125:PHE:CD1	19	48.74
(1,532)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	15	48.74
(1,380)	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	1:A:62:PHE:CD1	9	48.74
(1,177)	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	1:A:3:PHE:CD1	12	48.74
(1,665)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	17	48.7
(1,601)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	18	48.7
(1,229)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	14	48.7
(1,681)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	3	48.67
(1,393)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	14	48.66
(1,447)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	14	48.65
(1,492)	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	1:A:102:TYR:CD1	8	48.64
(1,486)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	16	48.64
(1,434)	1:A:79:GLY:C	1:A:80:GLY:N	1:A:80:GLY:CA	1:A:80:GLY:C	15	48.63
(1,375)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	2	48.63
(1,612)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	3	48.62
(1,366)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	20	48.62
(1,453)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	11	48.61
(1,288)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	12	48.61
(1,344)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	12	48.58
(1,463)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	19	48.56
(1,305)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	8	48.56
(1,239)	1:A:18:PRO:N	1:A:18:PRO:CA	1:A:18:PRO:C	1:A:19:ALA:N	19	48.55
(1,19)	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	17	48.55
(1,184)	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	1:A:4:GLU:CD	13	48.55
(1,357)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	16	48.54
(1,657)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	9	48.52
(1,304)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:CB	1:A:41:ASP:CG	10	48.52
(1,383)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	20	48.51
(1,501)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	17	48.49
(1,488)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	9	48.48
(1,242)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	15	48.47
(1,245)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	14	48.46
(1,646)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	15	48.42
(1,221)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	10	48.42
(1,501)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	8	48.38
(1,265)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	1	48.38
(1,378)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	11	48.37
(1,645)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	7	48.34
(1,380)	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	1:A:62:PHE:CD1	5	48.34
(1,231)	1:A:16:PRO:N	1:A:16:PRO:CA	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	17	48.33
(1,446)	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	1:A:83:GLY:CA	1:A:83:GLY:C	5	48.32
(1,522)	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	1:A:110:GLU:CD	9	48.31
(1,659)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	11	48.3
(1,601)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	19	48.3
(1,485)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	20	48.3
(1,549)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	16	48.29
(1,260)	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	1:A:25:GLN:CD	7	48.29
(1,536)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	3	48.28
(1,421)	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	1:A:75:PHE:CD1	5	48.28



Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,612)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	5	48.26
(1,369)	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	1:A:58:PHE:CD1	17	48.26
(1,287)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	7	48.26
(1,210)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	10	48.26
(1,242)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	1	48.25
(1,165)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	14	48.24
(1,535)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	14	48.23
(1,590)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	9	48.21
(1,587)	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	1:A:135:TYR:CD1	13	48.21
(1,528)	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	1:A:113:TYR:CD1	15	48.2
(1,429)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	12	48.19
(1,591)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	2	48.18
(1,231)	1:A:16:PRO:N	1:A:16:PRO:CA	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	15	48.14
(1,561)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	16	48.13
(1,534)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	5	48.13
(1,325)	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	1:A:44:GLN:CD	14	48.11
(1,243)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	12	48.11
(1,304)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:CB	1:A:41:ASP:CG	2	48.1
(1,573)	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	1:A:132:TYR:CD1	9	48.08
(1,528)	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	1:A:113:TYR:CD1	9	48.07
(1,344)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	4	48.07
(1,389)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	12	48.04
(1,615)	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	1:A:141:GLU:CD	4	48.03
(1,357)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	14	48.03
(1,12)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:C	1:A:15:ALA:N	14	48.03
(1,585)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	16	48.02
(1,357)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	15	48.01
(1,596)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	3	48.0
(1,614)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	5	47.99
(1,457)	1:A:86:ARG:C	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:C	2	47.97
(1,279)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	20	47.97
(1,668)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	16	47.96
(1,201)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	12	47.96
(1,531)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	17	47.95
(1,259)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	14	47.95
(1,285)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	7	47.94
(1,379)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	14	47.92
(1,200)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	8	47.92
(1,268)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	6	47.89
(1,646)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	10	47.87
(1,558)	1:A:126:ASP:N	1:A:126:ASP:CA	1:A:126:ASP:CB	1:A:126:ASP:CG	2	47.87
(1,585)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	7	47.86
(1,407)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:CB	1:A:71:VAL:CG1	8	47.86
(1,363)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	16	47.84
(1,507)	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	1:A:106:TYR:CD1	20	47.83
(1,440)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	2	47.82
(1,642)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	13	47.81
(1,682)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	16	47.8
(1,317)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	12	47.8
(1,245)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	16	47.8
(1,380)	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	1:A:62:PHE:CD1	Continu	47.78



	ed from previous pag				36 11	T71 1 11
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,483)	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	1:A:96:LYS:CD	8	47.76
(1,453)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	17	47.76
(1,174)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	10	47.71
(1,214)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	18	47.7
(1,559)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	3	47.69
(1,401)	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	1:A:69:PHE:CD1	11	47.67
(1,222)	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	1:A:12:LYS:CD	3	47.67
(1,12)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:C	1:A:15:ALA:N	3	47.64
(1,233)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	20	47.62
(1,376)	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	1:A:61:TYR:CD1	15	47.61
(1,184)	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	1:A:4:GLU:CD	2	47.61
(1,668)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	20	47.6
(1,549)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	7	47.59
(1,556)	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	1:A:125:PHE:CD1	14	47.58
(1,563)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	1	47.57
(1,416)	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	1:A:73:PHE:CD1	16	47.56
(1,164)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	9	47.55
(1,278)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	6	47.54
(1,531)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	4	47.53
(1,617)	1:A:141:GLU:C	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	19	47.52
(1,177)	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	1:A:3:PHE:CD1	10	47.52
(1,170)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	9	47.52
(1,630)	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:CB	1:A:145:ASP:CG	13	47.51
(1,484)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	9	47.49
(1,532)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	18	47.48
(1,491)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	2	47.46
(1,576)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	16	47.45
(1,19)	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	14	47.42
(1,682)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	12	47.41
(1,304)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:CB	1:A:41:ASP:CG	13	47.4
(1,583)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	3	47.39
(1,323)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	14	47.39
(1,225)	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	1:A:13:GLU:CD	18	47.39
(1,601)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	11	47.38
(1,368)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	4	47.36
(1,641)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	13	47.29
(1,296)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	7	47.26
(1,269)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	9	47.26
(1,280)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	19	47.25
(1,254)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	3	47.25
(1,367)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	3	47.24
(1,231)	1:A:16:PRO:N	1:A:16:PRO:CA	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	12	47.22
(1,244)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	4	47.21
(1,211) $(1,214)$	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	3	47.19
(1,214) $(1,416)$	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	1:A:73:PHE:CD1	19	47.18
(1,410) $(1,576)$	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	19	47.17
(1,576) $(1,555)$	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	12	47.17
(1,395) $(1,395)$	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	18	47.16
(1,395) $(1,285)$	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	5	47.15
(1,266) $(1,366)$	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	16	47.13
(1,566) $(1,554)$	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	10	47.13
(1,004)	1:A:120:FffE:N	1:A:120:FftE:UA	1:A:120:FftE:\CB	1:A:120:FftE:UG		47.12



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,366)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	5	47.09
(1,298)	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	1:A:39:TYR:CD1	15	47.09
(1,350)	1:A:49:GLN:C	1:A:50:GLY:N	1:A:50:GLY:CA	1:A:50:GLY:C	11	47.08
(1,587)	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	1:A:135:TYR:CD1	6	47.05
(1,453)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	19	47.05
(1,615)	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	1:A:141:GLU:CD	19	47.04
(1,19)	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	19	47.01
(1,426)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	18	46.99
(1,306)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	18	46.98
(1,354)	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	1:A:51:LYS:CD	18	46.94
(1,191)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	14	46.94
(1,594)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	18	46.93
(1,506)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	18	46.93
(1,630)	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:CB	1:A:145:ASP:CG	2	46.92
(1,391)	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	6	46.92
(1,325)	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	1:A:44:GLN:CD	4	46.92
(1,662)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	20	46.89
(1,489)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	18	46.89
(1,366)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	8	46.89
(1,288)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	20	46.88
(1,415)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	18	46.86
(1,680)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	1	46.85
(1,566)	1:A:128:SER:C	1:A:129:GLY:N	1:A:129:GLY:CA	1:A:129:GLY:C	11	46.84
(1,334)	1:A:45:LEU:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	4	46.79
(1,301)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	3	46.79
(1,261)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	9	46.79
(1,627)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	4	46.78
(1,630)	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:CB	1:A:145:ASP:CG	10	46.77
(1,595)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	13	46.74
(1,304)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:CB	1:A:41:ASP:CG	15	46.72
(1,156)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:C	1:A:150:ARG:N	9	46.72
(1,30)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:ALA:N	5	46.71
(1,598)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	13	46.7
(1,660)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	19	46.69
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	11	46.68
(1,290)	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	1:A:35:PHE:CD1	9	46.63
(1,12)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:C	1:A:15:ALA:N	8	46.62
(1,12) $(1,30)$	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:ALA:N	11	46.61
(1,279)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	2	46.6
(1,660)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	20	46.59
(1,346)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	5	46.59
(1,340) $(1,444)$	1:A:49.GLN.N 1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	9	46.58
(1,195)	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	1:A:6:GLN:CD	15	46.58
(1,193) $(1,194)$	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	11	46.58
(1,194) $(1,556)$	1:A:0:GEN:N 1:A:125:PHE:CA	1:A:0:GLN:CA 1:A:125:PHE:CB	1:A:0:GEN.CB 1:A:125:PHE:CG	1:A:125:PHE:CD1	11	46.56
(1,350) $(1,457)$	1:A:125:FHE:CA 1:A:86:ARG:C	1:A:125:FHE:CB	1:A:125:FHE:CG 1:A:87:VAL:CA	1:A:123:F11E:CD1	4	46.55
(1,437) $(1,182)$	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	14	46.55
(1,182) $(1,585)$	1:A:4:GLU:N 1:A:135:TYR:N	1:A:4:GLU:CA 1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:4:GLU:CG 1:A:135:TYR:CG	2	46.54
(1,651)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	15	46.53
(1,631) $(1,636)$	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	1:A:146:GLN:CD	10	46.51
· · /	1:A:146:GLN:CA 1:A:147:LEU:CA	1:A:146:GLN:CB 1:A:147:LEU:CB	1:A:146:GLN:CG 1:A:147:LEU:CG	1:A:146:GLN:CD 1:A:147:LEU:CD1	5	46.49
(1,642)	1:A:147:LEU:UA	1:A:14/:LEU:UB	1:A:147:LEU:UG	1:A:14/:LEU:UDI		40.49



	ed from previous pag				36 11	T71 1 14 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,357)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	7	46.49
(1,245)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	7	46.48
(1,463)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	3	46.47
(1,180)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	16	46.47
(1,208)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	5	46.46
(1,357)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	11	46.44
(1,657)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	7	46.43
(1,30)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:ALA:N	6	46.43
(1,290)	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	1:A:35:PHE:CD1	20	46.42
(1,430)	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	1:A:78:GLU:CD	1	46.37
(1,208)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	15	46.37
(1,177)	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	1:A:3:PHE:CD1	8	46.37
(1,672)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	6	46.36
(1,19)	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	2	46.36
(1,599)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:CB	1:A:137:ASP:CG	8	46.34
(1,298)	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	1:A:39:TYR:CD1	20	46.33
(1,204)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	1:A:8:VAL:N	2	46.33
(1,296)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	2	46.32
(1,254)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	8	46.32
(1,12)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:C	1:A:15:ALA:N	2	46.3
(1,409)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	3	46.29
(1,246)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	2	46.28
(1,473)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	3	46.27
(1,198)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	18	46.27
(1,558)	1:A:126:ASP:N	1:A:126:ASP:CA	1:A:126:ASP:CB	1:A:126:ASP:CG	5	46.24
(1,558)	1:A:126:ASP:N	1:A:126:ASP:CA	1:A:126:ASP:CB	1:A:126:ASP:CG	14	46.22
(1,490)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	15	46.22
(1,332)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	15	46.21
(1,630)	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:CB	1:A:145:ASP:CG	4	46.19
(1,562)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	19	46.18
(1,558)	1:A:126:ASP:N	1:A:126:ASP:CA	1:A:126:ASP:CB	1:A:126:ASP:CG	16	46.17
(1,164)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	13	46.16
(1,630)	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:CB	1:A:145:ASP:CG	12	46.14
(1,662)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	15	46.09
(1,490)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	18	46.09
(1,563)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	12	46.08
(1,535)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	4	46.08
(1,487)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	20	46.07
(1,423)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	13	46.06
(1,405)	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	1:A:70:GLU:CD	16	46.06
(1,562)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	14	46.04
(1,455)	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	1:A:86:ARG:CD	15	46.04
(1,416)	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	1:A:73:PHE:CD1	15	46.04
(1,164)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	19	46.03
(1,569)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	9	45.93
(1,632)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	11	45.92
(1,596)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	4	45.91
(1,558)	1:A:126:ASP:N	1:A:126:ASP:CA	1:A:126:ASP:CB	1:A:126:ASP:CG	13	45.88
(1,338) $(1,210)$	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	20	45.83
(1,210) $(1,634)$	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	16	45.82
(1,034) $(1,372)$	1:A:140:GLN:N 1:A:60:ARG:N	1:A:140:GLN:CA 1:A:60:ARG:CA	1:A:140:GLN:CB 1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	8	45.82
(1,314)	1.A.00.ANG:N	1.A.uu.ANG.UA	1.A.00.ANG.OD	1.A.00.ANG.CG		49.82



	ed from previous pag		A., 0		3.6.1.1	T 71 1 (1)
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,261)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	13	45.81
(1,481)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	4	45.8
(1,229)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	5	45.77
(1,220)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	14	45.77
(1,225)	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	1:A:13:GLU:CD	12	45.76
(1,182)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	13	45.76
(1,281)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	2	45.75
(1,446)	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	1:A:83:GLY:CA	1:A:83:GLY:C	10	45.72
(1,253)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	13	45.71
(1,295)	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	1:A:36:GLU:CD	1	45.7
(1,587)	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	1:A:135:TYR:CD1	3	45.69
(1,503)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	9	45.69
(1,385)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	13	45.69
(1,457)	1:A:86:ARG:C	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:C	3	45.67
(1,295)	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	1:A:36:GLU:CD	17	45.65
(1,646)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	2	45.64
(1,423)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	11	45.64
(1,352)	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	10	45.64
(1,288)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	14	45.63
(1,231)	1:A:16:PRO:N	1:A:16:PRO:CA	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	18	45.63
(1,220)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	6	45.62
(1,198)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	6	45.62
(1,622)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	12	45.6
(1,599)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:CB	1:A:137:ASP:CG	2	45.6
(1,416)	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	1:A:73:PHE:CD1	8	45.6
(1,239)	1:A:18:PRO:N	1:A:18:PRO:CA	1:A:18:PRO:C	1:A:19:ALA:N	17	45.6
(1,81)	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	8	45.59
(1,306)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	9	45.58
(1,556)	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	1:A:125:PHE:CD1	1	45.57
(1,323)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	19	45.55
(1,270)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	5	45.54
(1,485)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	7	45.49
(1,630)	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:CB	1:A:145:ASP:CG	6	45.44
(1,463)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	7	45.44
(1,211)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	8	45.44
(1,576)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	2	45.43
(1,246)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	9	45.43
(1,577)	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	1:A:133:GLU:CD	6	45.39
(1,632)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	19	45.38
(1,300)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	13	45.38
(1,503)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	5	45.37
(1,472)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	17	45.37
(1,246)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	5	45.37
(1,164)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	16	45.37
(1,684)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	6	45.36
(1,562)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	10	45.36
(1,327)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	12	45.35
(1,12)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:C	1:A:15:ALA:N	18	45.35
(1,434)	1:A:79:GLY:C	1:A:80:GLY:N	1:A:80:GLY:CA	1:A:80:GLY:C	9	45.34
(1,419)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	4	45.34
(1,551)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	19	45.33
(1,001)	1.A.122.A01 .IV	1.A.122.ASI .UA	1.A.122.ASI .UD	1.A.122.ASI .CG		40.00



Key	$egin{array}{c} ext{ed from previous pag} \ ext{ } ext{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,645)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	18	45.32
(1,319)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	20	45.31
(1,375) $(1,375)$	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	16	45.3
(1,491)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	16	45.27
(1,501)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	13	45.26
(1,680)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	4	45.25
(1,239)	1:A:18:PRO:N	1:A:18:PRO:CA	1:A:18:PRO:C	1:A:19:ALA:N	6	45.24
(1,12)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:C	1:A:15:ALA:N	13	45.23
(1,229)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	3	45.22
(1,573)	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	1:A:132:TYR:CD1	11	45.18
(1,3444)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	10	45.17
(1,320)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	12	45.16
(1,394)	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	9	45.15
(1,361) $(1,241)$	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	17	45.15
(1,669)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	11	45.12
(1,003) $(1,294)$	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	3	45.12
(1,234) $(1,534)$	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	13	45.11
(1,504) $(1,504)$	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	7	45.09
(1,304) $(1,275)$	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	16	45.04
(1,217) $(1,217)$	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	3	45.04
(1,302)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	3	45.03
(1,302) $(1,314)$	1:A:40:III5:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	2	45.02
(1,514) $(1,597)$	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	6	45.01
(1,397) $(1,447)$	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	15	45.01
(1,447) $(1,395)$	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	6	45.01
(1,393) $(1,278)$	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	14	45.01
(1,278) $(1,632)$	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	17	45.0
(1,032) $(1,549)$	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	19	44.99
(1,349) $(1,380)$	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	1:A:62:PHE:CD1	10	44.99
(1,580) $(1,590)$	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	4	44.98
(1,330) $(1,233)$	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	3	44.98
(1,233) $(1,189)$	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	14	44.98
(1,169) $(1,551)$	1:A:122:ASP:N	1:A:3:C15:CA 1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	18	44.97
(1,581) $(1,585)$	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:122:ASF:CB 1:A:135:TYR:CB	1:A:122:ASF::CG 1:A:135:TYR::CG	20	44.95
· · /	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	17	
(1,510)	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	1:A:108.GLU.C 1:A:96:LYS:CD	15	44.94 44.93
(1,483)	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	1:A:85:GLY:CA	1:A:90:L13:CD 1:A:85:GLY:C	13	44.93
(1,450)					2	
(1,640)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB 1:A:141:GLU:CA	1:A:147:LEU:CG 1:A:141:GLU:C	19	44.91
(1,611)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA 1:A:136:LEU:CG			44.91
(1,595)	1:A:136:LEU:CA 1:A:140:ALA:C	1:A:136:LEU:CB		1:A:136:LEU:CD1 1:A:141:GLU:C	12	44.9
(1,611)		1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA		8	44.89
(1,400)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	7	44.89
(1,369)	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	1:A:58:PHE:CD1	11	44.89
(1,650)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	6	44.88
(1,615)	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	1:A:141:GLU:CD	12	44.86
(1,337)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	6	44.85
(1,372)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	18	44.83
(1,330)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	2	44.83
(1,566)	1:A:128:SER:C	1:A:129:GLY:N	1:A:129:GLY:CA	1:A:129:GLY:C	13	44.81
(1,415)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	4	44.81
(1,512)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	7	44.79



	ed from previous pag					TT 1 . 1
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,443)	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	1:A:82:GLU:CD	15	44.78
(1,256)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	11	44.78
(1,587)	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	1:A:135:TYR:CD1	5	44.76
(1,448)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	19	44.76
(1,596)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	10	44.75
(1,510)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	8	44.75
(1,663)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	11	44.74
(1,551)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	9	44.74
(1,497)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	7	44.71
(1,184)	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	1:A:4:GLU:CD	14	44.71
(1,30)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:ALA:N	12	44.7
(1,30)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:ALA:N	15	44.7
(1,156)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:C	1:A:150:ARG:N	2	44.7
(1,318)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	12	44.69
(1,632)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	7	44.67
(1,385)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	12	44.67
(1,446)	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	1:A:83:GLY:CA	1:A:83:GLY:C	14	44.66
(1,658)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	9	44.62
(1,600)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	16	44.62
(1,615)	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	1:A:141:GLU:CD	10	44.61
(1,357)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	8	44.61
(1,306)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	16	44.6
(1,489)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	2	44.58
(1,415)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	11	44.58
(1,246)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	8	44.58
(1,593)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	4	44.57
(1,195)	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	1:A:6:GLN:CD	14	44.56
(1,279)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	16	44.54
(1,454)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	2	44.52
(1,447)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	6	44.52
(1,306)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	3	44.49
(1,513)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	3	44.47
(1,558)	1:A:126:ASP:N	1:A:126:ASP:CA	1:A:126:ASP:CB	1:A:126:ASP:CG	19	44.46
(1,583)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	8	44.45
(1,479)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	14	44.45
(1,204)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	1:A:8:VAL:N	16	44.45
(1,646)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	12	44.44
(1,643)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	17	44.44
(1,543)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	16	44.44
(1,204)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	1:A:8:VAL:N	20	44.44
(1,302)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	13	44.43
(1,664)	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	1:A:154:MET:SD	18	44.41
(1,400)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	5	44.35
(1,224)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	9	44.34
(1,200)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	4	44.34
(1,549)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	1	44.33
(1,549) $(1,549)$	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	12	44.33
(1,182)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	9	44.33
(1,102) $(1,426)$	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	10	44.3
(1,348)	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	1:A:49:GLN:CD	17	44.29
(1,348) $(1,272)$	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	13	44.29
(1,414)	1.11.20.0110.0	1.71.00.010.11	1.71.00.GLU.OA	1.71.00.GE0.0		od on nent nage



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,538)	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	1:A:117:MET:SD	3	44.28
(1,571)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	2	44.26
(1,549)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	6	44.26
(1,325)	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	1:A:44:GLN:CD	19	44.26
(1,527)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	10	44.25
(1,568)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	8	44.24
(1,587)	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	1:A:135:TYR:CD1	14	44.23
(1,530)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	12	44.23
(1,241)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	12	44.23
(1,551)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	13	44.22
(1,258)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	1	44.21
(1,218)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	20	44.18
(1,615)	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	1:A:141:GLU:CD	13	44.17
(1,444)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	17	44.16
(1,410)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	16	44.14
(1,288)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	8	44.14
(1,193)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	18	44.14
(1,319)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	11	44.11
(1,638)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	17	44.09
(1,504)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	11	44.07
(1,386)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	2	44.07
(1,379)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	7	44.07
(1,409)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	14	44.02
(1,177)	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	1:A:3:PHE:CD1	11	44.02
(1,434)	1:A:79:GLY:C	1:A:80:GLY:N	1:A:80:GLY:CA	1:A:80:GLY:C	1	44.01
(1,428)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	5	44.01
(1,562)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	8	44.0
(1,540)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	10	43.99
(1,204)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	1:A:8:VAL:N	17	43.99
(1,202)	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	1:A:7:PHE:CD1	5	43.99
(1,510)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	6	43.97
(1,404)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	1	43.95
(1,621)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	6	43.94
(1,643)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	12	43.93
(1,434)	1:A:79:GLY:C	1:A:80:GLY:N	1:A:80:GLY:CA	1:A:80:GLY:C	14	43.92
(1,662)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	17	43.91
(1,415)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	6	43.91
(1,380)	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	1:A:62:PHE:CD1	1	43.91
(1,585)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	11	43.89
(1,513)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	20	43.89
(1,575)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	11	43.88
(1,619)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	19	43.87
(1,316) $(1,286)$	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	5	43.86
(1,175)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	16	43.85
(1,638)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	16	43.84
(1,12)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:C	1:A:15:ALA:N	1	43.84
(1,12) $(1,666)$	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	12	43.81
(1,486)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	11	43.79
(1,480) $(1,288)$	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	10	43.79
(1,288) $(1,611)$	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	2	43.77
(1,011) $(1,443)$	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	1:A:82:GLU:CD	4	43.77
(1,440)	1.11.02.GLU.OA	1.71.02.010.01	1.71.02.010.00	1.11.02.010.00		40.11



	ed from previous pag		A	A / A	3.6 1.1	T 7* 1 4* ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,261)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	20	43.76
(1,551)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	2	43.75
(1,483)	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	1:A:96:LYS:CD	2	43.74
(1,12)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:C	1:A:15:ALA:N	17	43.74
(1,485)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	10	43.73
(1,440)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	16	43.73
(1,671)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	4	43.72
(1,627)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	19	43.72
(1,231)	1:A:16:PRO:N	1:A:16:PRO:CA	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	19	43.71
(1,279)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	19	43.69
(1,295)	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	1:A:36:GLU:CD	11	43.68
(1,269)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	1	43.67
(1,12)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:C	1:A:15:ALA:N	4	43.66
(1,551)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	12	43.64
(1,448)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	18	43.64
(1,368)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	1	43.62
(1,173)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	6	43.62
(1,385)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	11	43.61
(1,561)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	11	43.6
(1,445)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	19	43.6
(1,275)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	8	43.6
(1,285)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	4	43.58
(1,177)	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	1:A:3:PHE:CD1	9	43.58
(1,667)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	15	43.57
(1,323)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	1	43.57
(1,189)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	13	43.54
(1,366)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	17	43.53
(1,556)	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	1:A:125:PHE:CD1	13	43.52
(1,385)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	17	43.52
(1,362)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	14	43.52
(1,217)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	7	43.52
(1,573)	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	1:A:132:TYR:CD1	15	43.51
(1,520)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	12	43.51
(1,442)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	13	43.51
(1,385)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	6	43.51
(1,506)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	3	43.49
(1,673)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	2	43.48
(1,216)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	19	43.47
(1,596)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	12	43.46
(1,362)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	9	43.46
(1,245)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	18	43.46
(1,635)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	15	43.45
(1,481)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	3	43.44
(1,532)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	19	43.41
(1,284)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	16	43.41
(1,674)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	17	43.4
(1,450)	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	1:A:85:GLY:CA	1:A:85:GLY:C	9	43.4
(1,244)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	11	43.4
(1,352)	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	14	43.39
(1,659)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	14	43.36
(1,488)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	11	43.3
(=,=00)						ad an mant mass



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\circ)$
(1,337)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	7	43.3
(1,261)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	7	43.3
(1,179)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	4	43.3
(1,247)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	10	43.29
(1,585)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	1	43.28
(1,635)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	18	43.27
(1,451)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	7	43.26
(1,325)	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	1:A:44:GLN:CD	8	43.25
(1,621)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	20	43.24
(1,540)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	7	43.24
(1,395)	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	8	43.24
(1,619)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	3	43.23
(1,229)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	12	43.22
(1,330)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	4	43.21
(1,177)	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	1:A:3:PHE:CD1	19	43.21
(1,531)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	20	43.2
(1,439)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	4	43.19
(1,179)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	18	43.18
(1,12)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:C	1:A:15:ALA:N	15	43.18
(1,549)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	8	43.17
(1,210)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	18	43.17
(1,684)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	4	43.16
(1,671)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	20	43.15
(1,220)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	19	43.15
(1,490)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	11	43.13
(1,388)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	10	43.13
(1,535)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	10	43.12
(1,194)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	3	43.11
(1,188)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	20	43.11
(1,527)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	17	43.09
(1,549)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	9	43.08
(1,246)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	13	43.07
(1,507)	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	1:A:106:TYR:CD1	11	43.05
(1,405)	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	1:A:70:GLU:CD	10	43.02
(1,266)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB		2	43.02
(1,615)	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	1:A:141:GLU:CD	5	43.01
(1,414)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	1	42.97
(1,208)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	14	42.97
(1,265)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	9	42.94
(1,280)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	10	42.91
(1,221)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	3	42.91
(1,479)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1	42.9
(1,472)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	12	42.9
(1,441)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	7	42.9
(1,441) $(1,81)$	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	13	42.89
(1,57) $(1,578)$	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	10	42.89
(1,330)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	9	42.88
(1,213)	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	1:A:10:GLU:CD	19	42.87
(1,401)	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	1:A:69:PHE:CD1	2	42.86
(1,551)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	17	42.82
(1,454)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	20	42.82
(1,101)	1.11.00.11100.11	1.11.00.1110.011	1.11.00.111tG.OB	1.11.00.1110.00		ed on nert nage



	ed from previous pag			.	36 11	T71 1 14 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,444)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	12	42.81
(1,215)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	3	42.81
(1,210)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	17	42.78
(1,673)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	9	42.76
(1,385)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	5	42.76
(1,232)	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:C	7	42.76
(1,261)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	5	42.74
(1,681)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	5	42.73
(1,673)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	20	42.73
(1,543)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	18	42.71
(1,535)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	7	42.7
(1,239)	1:A:18:PRO:N	1:A:18:PRO:CA	1:A:18:PRO:C	1:A:19:ALA:N	3	42.7
(1,454)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	9	42.68
(1,444)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	11	42.68
(1,650)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	12	42.64
(1,561)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	20	42.64
(1,366)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	13	42.64
(1,526)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	7	42.63
(1,404)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	9	42.62
(1,388)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	13	42.62
(1,195)	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	1:A:6:GLN:CD	8	42.61
(1,595)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	2	42.6
(1,375)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	4	42.6
(1,280)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	20	42.6
(1,507)	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	1:A:106:TYR:CD1	9	42.59
(1,479)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	17	42.56
(1,357)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	20	42.55
(1,683)	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	1:A:157:GLU:CD	15	42.54
(1,556)	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	1:A:125:PHE:CD1	18	42.54
(1,632)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	12	42.53
(1,390)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	8	42.51
(1,488)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	8	42.49
(1,409)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	15	42.48
(1,210)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	19	42.47
(1,443)	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	1:A:82:GLU:CD	20	42.46
(1,563)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	10	42.45
(1,342)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:GLY:N	1:A:48:GLY:CA	1:A:48:GLY:C	6	42.43
(1,245)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	3	42.43
(1,593)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	2	42.42
(1,366)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	9	42.42
(1,30)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:ALA:N	7	42.42
(1,261)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	17	42.41
(1,454)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	3	42.38
(1,218)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	4	42.37
(1,575)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	17	42.36
(1,270)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	15	42.36
(1,545)	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:CB	1:A:120:VAL:CG1	18	42.35
(1,513) $(1,513)$	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	16	42.35
(1,313) $(1,244)$	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	17	42.35
(1,593)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	20	42.34
(1,568)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	3	42.3
(1,000)	1.71.100.010.11	1.11.100.GE0.OH	1.11.130.GE0.OB	1.71.150.GE0.CG		ad an next nage





Key	$egin{array}{c} ext{ed from previous pag} \ ext{ } ext{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,549)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	17	41.88
(1,510)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	16	41.88
(1,662)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	6	41.85
(1,251)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	18	41.85
(1,662)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	9	41.84
(1,634)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	4	41.83
(1,562)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	13	41.83
(1,554)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	5	41.83
(1,331) $(1,211)$	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	12	41.83
(1,211) $(1,200)$	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	3	41.83
(1,320)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	16	41.8
(1,520) $(1,549)$	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	2	41.79
(1,531) $(1,531)$	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	18	41.79
(1,531) $(1,510)$	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	2	41.78
(1,660)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	14	41.76
(1,389)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	16	41.74
(1,589) $(1,594)$	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	10	41.73
(1,594) $(1,570)$	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	1:A:130:GLU:CD1	19	41.73
(1,645)	1:A:148:ARG:N	1:A:130:GLU:CB 1:A:148:ARG:CA	1:A:130:GLU:CG 1:A:148:ARG:CB	1:A:130:GLU:CD 1:A:148:ARG:CG	3	41.73
(1,532)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	20	41.66
(1,332) $(1,201)$	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	7	41.66
(1,201) $(1,182)$	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	18	41.64
· · /	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	9	41.63
(1,479)		1:A:90:LYS:N 1:A:21:LEU:CA	1:A:90:L15:CA 1:A:21:LEU:CB	1:A:90:L15:C 1:A:21:LEU:CG	19	
(1,245)	1:A:21:LEU:N					41.63
(1,385)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	20	41.62
(1,538)	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	1:A:117:MET:SD	14	41.61
(1,551)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	16	41.6
(1,204)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	1:A:8:VAL:N	10	41.6
(1,643)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	7	41.59
(1,400)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	10	41.59
(1,645)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	8	41.57
(1,366)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	2	41.56
(1,630)	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:CB	1:A:145:ASP:CG	19	41.55
(1,568)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	12	41.55
(1,247)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	19	41.55
(1,571)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	10	41.54
(1,587)	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	1:A:135:TYR:CD1	16	41.5
(1,576)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	13	41.5
(1,483)	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	1:A:96:LYS:CD	5	41.5
(1,382)	1:A:62:PHE:C	1:A:63:GLY:N	1:A:63:GLY:CA	1:A:63:GLY:C	2	41.49
(1,19)	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	20	41.49
(1,575)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	3	41.46
(1,201)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	10	41.46
(1,669)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	10	41.45
(1,213)	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	1:A:10:GLU:CD	15	41.45
(1,176)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	8	41.45
(1,176)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	19	41.44
(1,566)	1:A:128:SER:C	1:A:129:GLY:N	1:A:129:GLY:CA	1:A:129:GLY:C	7	41.43
(1,542)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	1	41.43
(1,407)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:CB	1:A:71:VAL:CG1	6	41.43
(1,30)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:ALA:N	2	41.43



PRO:N 10 41.42 EU:CD1 9 41.41 GLU:C 11 41.4 GLY:C 2 41.39 YR:CG 16 41.38 IR:OG1 6 41.37 JLA:N 5 41.35 JN:CG 1 41.35 HE:CG 6 41.34 IET:C 14 41.32	Atom-4 1:A:105:PRO:N 1:A:127:LEU:CD1 1:A:78:GLU:C	Atom-3 1:A:104:GLY:C 1:A:127:LEU:CG	Atom-2 1:A:104:GLY:CA	Atom-1 1:A:104:GLY:N	Key (1,501)
EU:CD1 9 41.41 GLU:C 11 41.4 GLY:C 2 41.39 YR:CG 16 41.38 IR:OG1 6 41.37 ILA:N 5 41.35 IN:CG 1 41.35 HE:CG 6 41.34 IET:C 14 41.32	1:A:127:LEU:CD1		1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:N	(1501)
GLU:C 11 41.4 GLY:C 2 41.39 YR:CG 16 41.38 IR:OG1 6 41.37 LA:N 5 41.35 LN:CG 1 41.35 HE:CG 6 41.34 IET:C 14 41.32		L 1. A .197.I DII.CC			(, ,
GLY:C 2 41.39 YR:CG 16 41.38 IR:OG1 6 41.37 LA:N 5 41.35 LN:CG 1 41.35 HE:CG 6 41.34 IET:C 14 41.32	1. A . 7Q . CT II . C		1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CA	(1,561)
YR:CG 16 41.38 IR:OG1 6 41.37 IAA:N 5 41.35 LN:CG 1 41.35 HE:CG 6 41.34 IET:C 14 41.32		1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:N	1:A:77:VAL:C	(1,426)
IR:OG1 6 41.37 LA:N 5 41.35 N:CG 1 41.35 HE:CG 6 41.34 IET:C 14 41.32	1:A:85:GLY:C	1:A:85:GLY:CA	1:A:85:GLY:N	1:A:84:SER:C	(1,450)
LA:N 5 41.35 LN:CG 1 41.35 HE:CG 6 41.34 IET:C 14 41.32	1:A:39:TYR:CG	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:N	(1,296)
IN:CG 1 41.35 HE:CG 6 41.34 IET:C 14 41.32	1:A:89:THR:OG1	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:N	(1,463)
HE:CG 6 41.34 IET:C 14 41.32	1:A:97:ALA:N	1:A:96:LYS:C	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:N	(1,485)
MET:C 14 41.32	1:A:6:GLN:CG	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:N	(1,194)
	1:A:125:PHE:CG	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:N	(1,555)
CU:CD1 19 41.32	1:A:64:MET:C	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:N	1:A:63:GLY:C	(1,383)
	1:A:11:LEU:CD1	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CA	(1,219)
	1:A:75:PHE:CG	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:N	(1,419)
	1:A:28:MET:CG	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:N	(1,265)
	1:A:21:LEU:CD1	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CA	(1,247)
EU:CG 15 41.31	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:N	(1,226)
	1:A:156:HIS:C	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:N	1:A:155:LEU:C	(1,674)
RG:CG 2 41.3	1:A:23:ARG:CG	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:N	(1,254)
PHE:N 10 41.28	1:A:58:PHE:N	1:A:57:PRO:C	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:N	(1,366)
LU:N 17 41.28	1:A:4:GLU:N	1:A:3:PHE:C	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:N	(1,179)
IS:CG 4 41.27	1:A:40:HIS:CG	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:N	(1,300)
N:CG 7 41.27	1:A:6:GLN:CG	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:N	(1,193)
GLY:C 5 41.26	1:A:67:GLY:C	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:N	1:A:66:ALA:C	(1,395)
SER:C 4 41.25	1:A:128:SER:C	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:N	1:A:127:LEU:C	(1,564)
LU:CG 15 41.24	1:A:133:GLU:CG	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:N	(1,575)
EU:CG 12 41.24	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:N	(1,470)
EU:CG 8 41.22	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:N	(1,532)
EU:CG 8 41.22	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:N	(1,469)
LU:CG 1 41.21	1:A:10:GLU:CG	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:N	(1,212)
LU:CG 9 41.2	1:A:141:GLU:CG	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:N	(1,613)
ARG:N 8 41.2	1:A:150:ARG:N	1:A:149:THR:C	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:N	(1,156)
N:CG 12 41.19	1:A:6:GLN:CG	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:N	(1,194)
ASN:N 18 41.18	1:A:138:ASN:N	1:A:137:ASP:C	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:N	(1,600)
ΓHR:C 4 41.17	1:A:142:THR:C	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:N	1:A:141:GLU:C	(1,617)
RG:CG 5 41.17	1:A:23:ARG:CG	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:N	(1,254)
LN:N 7 41.16	1:A:44:GLN:N	1:A:43:LEU:C	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:N	(1,320)
HE:N 18 41.16	1:A:7:PHE:N	1:A:6:GLN:C	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:N	(1,197)
SP:CG 11 41.14	1:A:122:ASP:CG	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:N	(1,551)
YR:CG 3 41.13	1:A:132:TYR:CG	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:N	(1,572)
SP:CG 3 41.12	1:A:114:ASP:CG	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:N	(1,531)
LU:CG 18 41.12	1:A:110:GLU:CG	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:N	(1,521)
	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:N	(1,592)
	1:A:69:PHE:CG	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:N	(1,400)
RG:CG 16 41.09	1:A:23:ARG:CG	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:N	(1,254)
	1:A:135:TYR:CG	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:N	(1,585)
	1:A:150:ARG:N	1:A:149:THR:C	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:N	(1,156)
	1:A:41:ASP:C	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:N	1:A:40:HIS:C	(1,302)
	1:A:28:MET:CG	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:N	(1,265)
	1:A:25:GLN:CG	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:N	· · /
	1:A:154:MET:CG	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:N	,
	1:A:97:ALA:N	1:A:96:LYS:C	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:N	(1,484)
	1:A:86:ARG:CG	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:N	(1,453)
HE:CG 6 41.0 RG:CG 16 41.0 YR:CG 6 41.0 ARG:N 13 41.0 ASP:C 20 41.0 ET:CG 12 41.0 LN:CG 18 41.0	1:A:69:PHE:CG 1:A:23:ARG:CG 1:A:135:TYR:CG 1:A:150:ARG:N 1:A:41:ASP:C 1:A:28:MET:CG 1:A:25:GLN:CG	1:A:69:PHE:CB 1:A:23:ARG:CB 1:A:135:TYR:CB 1:A:149:THR:C 1:A:41:ASP:CA 1:A:28:MET:CB 1:A:25:GLN:CB	1:A:69:PHE:CA 1:A:23:ARG:CA 1:A:135:TYR:CA 1:A:149:THR:CA 1:A:41:ASP:N 1:A:28:MET:CA 1:A:25:GLN:CA	1:A:69:PHE:N 1:A:23:ARG:N 1:A:135:TYR:N 1:A:149:THR:N 1:A:40:HIS:C 1:A:28:MET:N 1:A:25:GLN:N	(1,400) (1,254) (1,585) (1,156) (1,302)



Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,434)	1:A:79:GLY:C	1:A:80:GLY:N	1:A:80:GLY:CA	1:A:80:GLY:C	20	41.05
(1,334)	1:A:45:LEU:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	10	41.05
(1,261)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	2	41.05
(1,613)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	18	41.04
(1,671)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	14	41.03
(1,645)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	1	41.02
(1,337)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	16	41.02
(1,289)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	18	41.01
(1,304)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:CB	1:A:41:ASP:CG	6	40.99
(1,247)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	3	40.99
(1,184)	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	1:A:4:GLU:CD	19	40.99
(1,563)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	19	40.98
(1,336)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	12	40.98
(1,512)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	18	40.96
(1,451)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	17	40.95
(1,279)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	3	40.94
(1,81)	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	12	40.93
(1,176)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	3	40.93
(1,268)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	3	40.92
(1,208)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	10	40.91
(1,306)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	6	40.89
(1,300) $(1,302)$	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	16	40.88
(1,552) $(1,559)$	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	16	40.87
(1,551)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	14	40.87
(1,331) $(1,217)$	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	16	40.82
(1,669)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	4	40.81
(1,261)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	16	40.8
(1,645)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	20	40.79
(1,632)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	20	40.78
(1,501)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	1	40.78
(1,347)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	9	40.77
(1,280)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	4	40.77
(1,164)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	11	40.77
(1,214)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	19	40.76
(1,416)	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	1:A:73:PHE:CD1	1	40.75
(1,581)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	13	40.72
(1,279)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	7	40.71
(1,247)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	20	40.71
(1,241)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	7	40.69
(1,391)	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	4	40.68
(1,306)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	4	40.68
(1,670)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	11	40.67
(1,613)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	1	40.67
(1,563)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	9	40.67
(1,473)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	17	40.67
(1,288)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	15	40.67
(1,527)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	5	40.64
(1,595)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	11	40.63
(1,650)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	4	40.62
(1,342)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:GLY:N	1:A:48:GLY:CA	1:A:48:GLY:C	15	40.61
(1,342) $(1,301)$	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	5	40.61
(+,00+)	1.11.10.1110.11		1			ed on nert nage



Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,165)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	7	40.61
(1,657)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	6	40.6
(1,344)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	8	40.59
(1,184)	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	1:A:4:GLU:CD	6	40.59
(1,214)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	15	40.58
(1,645)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	17	40.57
(1,507)	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	1:A:106:TYR:CD1	8	40.57
(1,681)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	2	40.56
(1,423)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	14	40.56
(1,554)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	2	40.55
(1,554)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	18	40.54
(1,251)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	10	40.5
(1,474)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	6	40.49
(1,362)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	6	40.48
(1,200)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	1	40.48
(1,212)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	2	40.47
(1,504)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	8	40.46
(1,308)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	6	40.46
(1,265)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	17	40.45
(1,549)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	15	40.43
(1,373)	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	1:A:60:ARG:CD	20	40.42
(1,261)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	6	40.42
(1,593)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	8	40.41
(1,554)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	3	40.4
(1,485)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	18	40.4
(1,286)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	3	40.4
(1,545)	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:CB	1:A:120:VAL:CG1	16	40.38
(1,453)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	15	40.38
(1,229)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	16	40.38
(1,198)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	14	40.38
(1,380)	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	1:A:62:PHE:CD1	17	40.37
(1,613)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	7	40.36
(1,342)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:GLY:N	1:A:48:GLY:CA	1:A:48:GLY:C	10	40.36
(1,551)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	10	40.35
(1,532)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	6	40.35
(1,457)	1:A:86:ARG:C	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:C	11	40.35
(1,419)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	19	40.35
(1,407)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:CB	1:A:71:VAL:CG1	15	40.35
(1,30)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:ALA:N	13	40.35
(1,258)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	16	40.35
(1,339)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	4	40.34
(1,457)	1:A:86:ARG:C	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:C	5	40.32
(1,572)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	4	40.29
(1,269)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	8	40.27
(1,497)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	5	40.26
(1,488)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	12	40.26
(1,191)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	4	40.26
(1,400)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	11	40.24
(1,231)	1:A:16:PRO:N	1:A:16:PRO:CA	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	11	40.24
(1,423)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	18	40.23
(1,633)	1:A:145:ASP:C	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:C	15	40.21



	ed from previous pag		A	A 1	N.C. 1.1	T 7* . 1 . 4*
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,81)	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	11	40.19
(1,407)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:CB	1:A:71:VAL:CG1	1	40.18
(1,549)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	5	40.17
(1,265)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	18	40.16
(1,221)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	15	40.16
(1,585)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	14	40.14
(1,330)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	19	40.14
(1,627)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	11	40.13
(1,613)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	13	40.13
(1,166)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	13	40.12
(1,595)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	20	40.11
(1,647)	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	1:A:148:ARG:CD	8	40.1
(1,317)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	18	40.1
(1,388)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	8	40.09
(1,386)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	4	40.09
(1,374)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	6	40.09
(1,350)	1:A:49:GLN:C	1:A:50:GLY:N	1:A:50:GLY:CA	1:A:50:GLY:C	12	40.08
(1,305)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	13	40.05
(1,217)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	11	40.03
(1,510)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	19	40.02
(1,442)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	11	40.02
(1,594)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	7	40.0
(1,552)	1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:CA	1:A:123:ASN:CB	1:A:123:ASN:CG	8	40.0
(1,457)	1:A:86:ARG:C	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:C	14	40.0
(1,275)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	6	40.0
(1,246)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	11	40.0
(1,571)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	16	39.99
(1,538)	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	1:A:117:MET:SD	5	39.99
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	3	39.99
(1,470)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	17	39.98
(1,174)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	5	39.98
(1,382)	1:A:62:PHE:C	1:A:63:GLY:N	1:A:63:GLY:CA	1:A:63:GLY:C	7	39.97
(1,526)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	19	39.96
(1,549)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	10	39.95
(1,413)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:PHE:N	12	39.95
(1,681)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	20	39.94
(1,681)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	4	39.93
(1,507)	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	1:A:106:TYR:CD1	4	39.93
(1,450)	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	1:A:85:GLY:CA	1:A:85:GLY:C	20	39.93
(1,392)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	6	39.93
(1,175)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	15	39.93
(1,666)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	19	39.92
(1,659)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	5	39.91
(1,305)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	10	39.9
(1,491)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	19	39.87
(1,350)	1:A:49:GLN:C	1:A:50:GLY:N	1:A:50:GLY:CA	1:A:50:GLY:C	19	39.85
(1,320)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	14	39.85
(1,666)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	16	39.84
(1,397)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	15	39.84
(1,397) $(1,352)$	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	17	39.84
· · /	1:A:31:L15:N 1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:31:L15:CG 1:A:122:ASP:CG	15	39.83
(1,551)	1:A:122:A5P:N	1:A:122:A5P:UA	1:A:122:A5P:UB	1:A:122:A5P:UG		39.83



Key	$egin{array}{c} ext{ed from previous pag} \ ext{ } ext{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,183)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	2	39.82
(1,662)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	1	39.8
(1,189)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	15	39.8
(1,166)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	17	39.79
(1,585)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	5	39.76
(1,330)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	3	39.75
(1,301)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	15	39.75
(1,297)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	18	39.75
(1,434)	1:A:79:GLY:C	1:A:80:GLY:N	1:A:80:GLY:CA	1:A:80:GLY:C	4	39.74
(1,578)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	8	39.71
(1,594)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	16	39.7
(1,470)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	2	39.7
(1,568)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	20	39.68
(1,448)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	11	39.68
(1,246)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	6	39.67
(1,352)	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	20	39.66
(1,347)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	12	39.66
(1,319)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	19	39.65
(1,619)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	7	39.64
(1,492)	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	1:A:102:TYR:CD1	7	39.64
(1,215)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	4	39.64
(1,231)	1:A:16:PRO:N	1:A:16:PRO:CA	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	8	39.63
(1,285)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1	39.62
(1,229)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	8	39.62
(1,12)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:C	1:A:15:ALA:N	9	39.62
(1,285)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	12	39.6
(1,532)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	3	39.59
(1,344)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	9	39.59
(1,327)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	20	39.59
(1,533)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	5	39.58
(1,261)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	18	39.58
(1,593)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	11	39.57
(1,352)	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	11	39.56
(1,224)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	1	39.56
(1,447)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	3	39.55
(1,390)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	6	39.55
(1,317)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	8	39.55
(1,330)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	11	39.54
(1,441)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	19	39.51
(1,215)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	13	39.5
(1,451)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	19	39.49
(1,611)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	12	39.47
(1,485)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	11	39.46
(1,677)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	19	39.45
(1,368)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	8	39.45
(1,253)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	17	39.45
(1,556)	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	1:A:125:PHE:CD1	9	39.43
(1,296)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	1	39.43
(1,276)	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	1:A:30:GLU:CD	19	39.41
(1,473)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	18	39.39
(1,394)	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	2	39.39



	ed from previous pag		A	A / A	3.6 1.1	T 7* 1 4* ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,439)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	6	39.37
(1,558)	1:A:126:ASP:N	1:A:126:ASP:CA	1:A:126:ASP:CB	1:A:126:ASP:CG	4	39.34
(1,195)	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	1:A:6:GLN:CD	13	39.33
(1,378)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	18	39.32
(1,638)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	2	39.29
(1,212)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	5	39.29
(1,630)	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:CB	1:A:145:ASP:CG	17	39.28
(1,551)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	8	39.28
(1,491)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	5	39.28
(1,575)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	20	39.25
(1,563)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	18	39.25
(1,308)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	10	39.25
(1,613)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	12	39.24
(1,288)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	11	39.24
(1,566)	1:A:128:SER:C	1:A:129:GLY:N	1:A:129:GLY:CA	1:A:129:GLY:C	20	39.23
(1,497)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	3	39.22
(1,380)	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	1:A:62:PHE:CD1	12	39.22
(1,671)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	10	39.21
(1,224)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	17	39.2
(1,426)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	7	39.19
(1,627)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	3	39.17
(1,288)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	5	39.17
(1,662)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	3	39.16
(1,651)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	18	39.16
(1,169)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	5	39.15
(1,543)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	11	39.14
(1,421)	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	1:A:75:PHE:CD1	19	39.13
(1,165)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	20	39.13
(1,366)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	4	39.12
(1,317)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	13	39.12
(1,543)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	20	39.11
(1,165)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	1	39.1
(1,514)	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	1:A:108:GLU:CD	14	39.09
(1,510)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	18	39.09
(1,658)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	18	39.08
(1,556)	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	1:A:125:PHE:CD1	4	39.08
(1,541)	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	1:A:118:LYS:CD	3	39.07
(1,634)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	10	39.06
(1,630)	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:CB	1:A:145:ASP:CG	7	39.06
(1,513)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	2	39.05
(1,352)	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	1	39.04
(1,218)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	13	39.04
(1,253)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	6	39.02
(1,245)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	10	39.02
(1,218)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	17	39.01
(1,337)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	8	38.99
(1,272)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	16	38.99
(1,256)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	1	38.99
(1,634)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	13	38.98
(1,332)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	1	38.96
(1,332) $(1,227)$	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	17	38.95
(1,441)	1.11.14.110.11	1.11.14.DD0.OA	1.11.14.110.00	1.11.14.1110.00		od on nort nage



Key	ed from previous pag Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,165)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	10	38.95
(1,105) $(1,246)$	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	10	38.92
(1,481)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	20	38.91
(1,401) $(1,224)$	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	14	38.91
(1,484)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	19	38.9
(1,434) $(1,231)$	1:A:16:PRO:N	1:A:16:PRO:CA	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	16	38.9
(1,231) $(1,214)$	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	10	38.9
(1,214) $(1,165)$	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	8	38.89
(1,103) $(1,494)$	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	15	38.88
(1,434) $(1,662)$	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	7	38.87
(1,612)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	10	38.87
(1,549)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	14	38.87
(1,549) $(1,524)$	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	15	38.87
(1,324) $(1,471)$	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	20	38.87
(1,471) $(1,404)$	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	3	38.86
(1,404) $(1,501)$	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	7	38.85
(1,501) $(1,540)$	1:A:104:GLY:N 1:A:118:LYS:N	1:A:104:GLY:CA 1:A:118:LYS:CA	1:A:104:GL1:C 1:A:118:LYS:CB	1:A:105:PRO:N 1:A:118:LYS:CG	3	38.84
(1,340) $(1,385)$	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	1	38.83
(1,303) $(1,317)$	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	10	38.83
(1,317) $(1,619)$	1:A:43:LEU:N 1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:43:LEU:CB 1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	2	38.82
(1,619) $(1,649)$	1:A:142:THR:N 1:A:149:THR:N	1:A:142:THR:CA 1:A:149:THR:CA	1:A:142:THR:CB 1:A:149:THR:CB	1:A:142:THR:OG1 1:A:149:THR:OG1	2	38.81
· · /	1:A:149:1 HK:N 1:A:127:LEU:C	1:A:149:11R:CA 1:A:128:SER:N	1:A:149:11R:CB 1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	3	38.81
(1,564)				1:A:28:MET:CG	16	38.79
(1,265)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB			
(1,193)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	17	38.78
(1,12)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:C	1:A:15:ALA:N	16	38.78
(1,477)	1:A:93:PRO:N	1:A:93:PRO:CA	1:A:93:PRO:C	1:A:94:SER:N	14	38.77
(1,510)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	3	38.76
(1,533)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	9	38.75
(1,261)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	19	38.75
(1,650)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	14	38.74
(1,371)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	15	38.74
(1,634)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	12	38.72
(1,575)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	8	38.72
(1,512)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	4	38.72
(1,562)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	7	38.71
(1,528)	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	1:A:113:TYR:CD1	11	38.71
(1,221)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	16	38.71
(1,175)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	1	38.71
(1,362)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	7	38.7
(1,532)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	11	38.68
(1,594)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	5	38.67
(1,278)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	9	38.67
(1,165)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	16	38.66
(1,250)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	12	38.65
(1,488)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	10	38.63
(1,453)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	16	38.62
(1,590)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	16	38.61
(1,244)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	13	38.61
(1,181)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	11	38.6
(1,512)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	19	38.59
(1,366)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	15	38.58



	ed from previous pag				36 11	T71 1 14 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,245)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	20	38.56
(1,173)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	1	38.56
(1,297)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	9	38.55
(1,239)	1:A:18:PRO:N	1:A:18:PRO:CA	1:A:18:PRO:C	1:A:19:ALA:N	14	38.55
(1,334)	1:A:45:LEU:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	12	38.54
(1,331)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	17	38.54
(1,330)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	12	38.54
(1,346)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	18	38.53
(1,652)	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	1:A:150:ARG:CD	2	38.5
(1,670)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	15	38.48
(1,628)	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	2	38.48
(1,423)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	5	38.48
(1,280)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	8	38.48
(1,578)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	11	38.46
(1,268)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	9	38.46
(1,175)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	7	38.46
(1,634)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	14	38.45
(1,399)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	8	38.41
(1,242)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	8	38.41
(1,223)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	5	38.4
(1,674)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	6	38.39
(1,569)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	10	38.39
(1,374)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	7	38.39
(1,239)	1:A:18:PRO:N	1:A:18:PRO:CA	1:A:18:PRO:C	1:A:19:ALA:N	2	38.38
(1,215)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	16	38.38
(1,186)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	14	38.38
(1,30)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:ALA:N	20	38.37
(1,560)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	5	38.36
(1,483)	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	1:A:96:LYS:CD	14	38.36
(1,323)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	12	38.36
(1,308)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	18	38.36
(1,676)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	5	38.35
(1,662)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	14	38.35
(1,215)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	6	38.35
(1,286)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	11	38.34
(1,182)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	11	38.33
(1,677)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	15	38.32
(1,554)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	11	38.32
(1,521)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	3	38.32
(1,477)	1:A:93:PRO:N	1:A:93:PRO:CA	1:A:93:PRO:C	1:A:94:SER:N	19	38.32
(1,375)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	14	38.31
(1,218)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	8	38.31
(1,212)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	17	38.3
(1,491)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	1	38.29
(1,200)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	6	38.29
(1,448)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	4	38.27
(1,682)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	8	38.25
(1,217)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	8	38.25
(1,621)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	2	38.24
(1,347)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	14	38.24
(1,164)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	6	38.24
(-,-0-)			1.111100.22.00		_	ad an mant naga



Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,611)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	9	38.21
(1,448)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	20	38.21
(1,241)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	4	38.2
(1,200)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	2	38.2
(1,561)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	1	38.19
(1,337)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	20	38.19
(1,486)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	10	38.18
(1,444)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	6	38.18
(1,590)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	7	38.17
(1,325)	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	1:A:44:GLN:CD	15	38.16
(1,352)	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	16	38.15
(1,281)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	13	38.14
(1,543)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	2	38.13
(1,484)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	6	38.11
(1,652)	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	1:A:150:ARG:CD	11	38.09
(1,210)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	2	38.09
(1,290)	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	1:A:35:PHE:CD1	10	38.08
(1,526)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	2	38.06
(1,231)	1:A:16:PRO:N	1:A:16:PRO:CA	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	1	38.06
(1,220)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	20	38.06
(1,379)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	15	38.05
(1,472)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	2	38.04
(1,635)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	20	38.01
(1,471)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	3	38.01
(1,551)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	4	37.99
(1,425)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:CB	1:A:77:VAL:CG1	7	37.98
(1,368)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	12	37.98
(1,354)	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	1:A:51:LYS:CD	2	37.98
(1,594)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	9	37.97
(1,423)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	7	37.95
(1,363)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	12	37.94
(1,301)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	2	37.94
(1,507)	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	1:A:106:TYR:CD1	15	37.93
(1,251)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	16	37.93
(1,254)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	11	37.92
(1,231)	1:A:16:PRO:N	1:A:16:PRO:CA	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	10	37.92
(1,330)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	7	37.9
(1,407)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:CB	1:A:71:VAL:CG1	14	37.89
(1,623)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	6	37.88
(1,538)	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	1:A:117:MET:SD	6	37.88
(1,455)	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	1:A:86:ARG:CD	18	37.88
(1,215)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	14	37.88
(1,680)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	10	37.87
(1,481)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	8	37.86
(1,218)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	18	37.86
(1,611)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	10	37.83
(1,646)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	14	37.82
(1,561)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	18	37.8
(1,259)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	17	37.8
(1,651)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	1	37.78
(1,217)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	4	37.78



Key	$egin{array}{c} ext{ed from previous pag} \ ext{ } ext{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,596)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	11	37.77
(1,374)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	3	37.77
(1,634)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	17	37.75
(1,507) $(1,507)$	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	1:A:106:TYR:CD1	12	37.75
(1,331) $(1,471)$	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	13	37.75
(1,368)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	10	37.73
(1,346)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	19	37.73
(1,330)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	16	37.73
(1,657)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	16	37.72
(1,256)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	9	37.72
(1,287)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	19	37.71
(1,540)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	11	37.7
(1,400)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	20	37.7
(1,193)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	19	37.7
(1,551)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	5	37.65
(1,331) $(1,488)$	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	5	37.63
(1,466) $(1,265)$	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	20	37.62
(1,205) $(1,415)$	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	15	37.61
(1,413) $(1,287)$	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	6	37.61
(1,510)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	11	37.6
(1,310) $(1,176)$	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	10	37.6
(1,170) $(1,549)$	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	20	37.59
(1,545) $(1,535)$	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	17	37.59
(1,383) $(1,383)$	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	7	37.59
(1,363) $(1,253)$	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	20	37.59
(1,233) $(1,614)$	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	16	37.58
(1,014) $(1,411)$	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	14	37.58
(1,411) $(1,575)$	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	5	37.57
(1,375) $(1,485)$	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	12	37.57
(1,450) $(1,650)$	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	20	37.56
(1,302)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	7	37.56
(1,302) $(1,239)$	1:A:18:PRO:N	1:A:18:PRO:CA	1:A:18:PRO:C	1:A:19:ALA:N	15	37.56
(1,239) $(1,188)$	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	9	37.56
(1,188) $(1,182)$	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	4	37.55
,	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	10	37.53
(1,306) $(1,261)$	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	14	37.53
(1,201) $(1,250)$	1:A:20:IIIIc.N 1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	18	37.52
` /	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	1:A:73:PHE:CD1	5	37.51
(1,416) (1,549)	1:A:121:ASP:N	1:A:73:PHE:CB 1:A:121:ASP:CA	1:A:73:PHE:CG 1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	13	37.49
· · /	1:A:121:ASP:N 1:A:11:LEU:N	1:A:121:ASP:CA 1:A:11:LEU:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASF:CG 1:A:11:LEU:CG	2	37.49
(1,217)	1:A:11:LEU:N 1:A:35:PHE:CA	1:A:11:LEU:CA 1:A:35:PHE:CB	1:A:11:LEU:CB 1:A:35:PHE:CG	1:A:11:LEU:CG 1:A:35:PHE:CD1		
(1,290)		1:A:35:PHE:CB 1:A:28:MET:CA	1:A:35:PHE:CG 1:A:28:MET:CB	1:A:35:PHE:CD1 1:A:28:MET:CG	6 15	37.47
(1,266)	1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB 1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG 1:A:28:MET:CG		37.47
(1,265)	1:A:28:ME1:N 1:A:92:THR:N	1:A:28:ME1:CA 1:A:92:THR:CA	1:A:28:ME1:CB 1:A:92:THR:CB	1:A:28:ME1:CG 1:A:92:THR:OG1	6	37.47
(1,473)	1:A:92:1HK:N 1:A:141:GLU:C	1:A:92:THR:CA 1:A:142:THR:N	1:A:92:THR:CB 1:A:142:THR:CA	1:A:92:THR:OG1 1:A:142:THR:C	7	37.46 37.43
(1,617)	1:A:141:GLU:C 1:A:135:TYR:C		1:A:142:THR:CA 1:A:136:LEU:CA		8	
(1,590)	1:A:135:1 Y R:C 1:A:3:PHE:N	1:A:136:LEU:N 1:A:3:PHE:CA	1:A:130:LEU:CA 1:A:3:PHE:CB	1:A:136:LEU:C 1:A:3:PHE:CG	8 5	37.43 37.43
(1,175)						
(1,317)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	5	37.42
(1,666)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA 1:A:147:LEU:CG	1:A:155:LEU:C	6	37.41
(1,643)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB		1:A:147:LEU:CD1	14	37.41
(1,671)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	8	37.4



(1,184)	Atom-1 1:A:4:GLU:CA	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	V iolation (\circ)
/	1 · A · A · C · L L · C · A					· /
		1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	1:A:4:GLU:CD	17	37.39
(1,357)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1	37.35
(1,613)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	10	37.34
(1,253)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	4	37.33
(1,193)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	20	37.33
(1,245)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	12	37.32
(1,457)	1:A:86:ARG:C	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:C	20	37.31
(1,415)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	2	37.31
(1,337)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	4	37.3
(1,510)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	15	37.28
(1,270)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	6	37.28
(1,410)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	8	37.27
(1,284)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	14	37.27
(1,224)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	8	37.26
(1,563)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	13	37.25
(1,166)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	3	37.24
(1,638)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	20	37.23
(1,239)	1:A:18:PRO:N	1:A:18:PRO:CA	1:A:18:PRO:C	1:A:19:ALA:N	8	37.23
(1,211)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	9	37.22
(1,472)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	9	37.2
(1,217)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	6	37.2
(1,404)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	20	37.19
(1,342)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:GLY:N	1:A:48:GLY:CA	1:A:48:GLY:C	7	37.19
(1,275)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	4	37.19
(1,177)	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	1:A:3:PHE:CD1	1	37.19
(1,656)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	4	37.18
(1,569)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	16	37.18
(1,285)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	20	37.18
(1,404)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	13	37.15
(1,248)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	19	37.15
(1,242)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	3	37.15
(1,531)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	14	37.11
(1,569)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	7	37.08
(1,346)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	3	37.07
(1,494)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	3	37.06
(1,256)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	17	37.05
(1,388)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	9	37.04
(1,603)	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:CB	1:A:138:ASN:CG	7	37.03
(1,555)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	20	37.03
(1,645)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	6	37.02
(1,165)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	11	37.02
(1,685)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	10	37.01
(1,274)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	10	37.01
(1,521)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	4	37.0
(1,30)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:ALA:N	8	36.99
(1,419)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	14	36.98
(1,471)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	8	36.97
(1,602)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	3	36.96
(1,253)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	9	36.96
(1,176)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	20	36.96



	ed from previous pag			.	36 11	T71 1 14 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,275)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	7	36.95
(1,211)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	11	36.95
(1,337)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	3	36.94
(1,273)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	4	36.93
(1,193)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	2	36.92
(1,685)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	3	36.89
(1,451)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	10	36.89
(1,280)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	14	36.89
(1,658)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	8	36.88
(1,425)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:CB	1:A:77:VAL:CG1	13	36.87
(1,193)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	5	36.87
(1,330)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	18	36.86
(1,334)	1:A:45:LEU:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	18	36.85
(1,674)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	13	36.84
(1,575)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	18	36.84
(1,569)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	13	36.82
(1,512)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	1	36.82
(1,393)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	7	36.82
(1,222)	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	1:A:12:LYS:CD	6	36.82
(1,342)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:GLY:N	1:A:48:GLY:CA	1:A:48:GLY:C	17	36.81
(1,300)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	6	36.81
(1,187)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	9	36.8
(1,569)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	5	36.79
(1,255)	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	1:A:23:ARG:CD	2	36.79
(1,221)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	9	36.79
(1,660)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	13	36.77
(1,182)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	3	36.77
(1,394)	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	7	36.76
(1,292)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	12	36.76
(1,247)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	18	36.76
(1,535)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	16	36.75
(1,481)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	14	36.75
(1,385)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	19	36.75
(1,622)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	14	36.73
(1,367)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	5	36.73
(1,172)	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	13	36.72
(1,30)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:ALA:N	16	36.71
(1,294)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	18	36.71
(1,569)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	11	36.7
(1,367)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	16	36.68
(1,259)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	10	36.65
(1,200)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	19	36.65
(1,477)	1:A:93:PRO:N	1:A:93:PRO:CA	1:A:93:PRO:C	1:A:94:SER:N	15	36.64
(1,472)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	19	36.63
(1,302)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	10	36.62
(1,382) $(1,286)$	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	2	36.62
(1,654)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	3	36.58
(1,401)	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	1:A:69:PHE:CD1	17	36.58
(1,401) $(1,477)$	1:A:93:PRO:N	1:A:93:PRO:CA	1:A:93:PRO:C	1:A:94:SER:N	20	36.57
(1,352)	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	12	36.57
(1,392) $(1,194)$	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	10	36.57
(1,134)	1.71.0.0111.11	1.11.0.GLIV.OA	1.71.0.0111.01	1.71.0.GEN.OG		00.01



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,507)	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	1:A:106:TYR:CD1	19	36.56
(1,182)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	1	36.55
(1,622)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	19	36.54
(1,611)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	1	36.54
(1,434)	1:A:79:GLY:C	1:A:80:GLY:N	1:A:80:GLY:CA	1:A:80:GLY:C	19	36.54
(1,347)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	15	36.54
(1,414)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	8	36.53
(1,330)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	10	36.51
(1,223)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	4	36.51
(1,12)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:C	1:A:15:ALA:N	5	36.5
(1,372)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	10	36.49
(1,308)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	14	36.48
(1,231)	1:A:16:PRO:N	1:A:16:PRO:CA	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	6	36.48
(1,222)	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	1:A:12:LYS:CD	11	36.48
(1,497)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	9	36.47
(1,231)	1:A:16:PRO:N	1:A:16:PRO:CA	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	7	36.47
(1,460)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	4	36.46
(1,415)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	13	36.46
(1,265)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	11	36.46
(1,474)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	5	36.44
(1,400)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	3	36.44
(1,454)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	7	36.43
(1,685)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	5	36.41
(1,578)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	4	36.4
(1,485)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	3	36.4
(1,296)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	10	36.4
(1,494)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	2	36.37
(1,253)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	12	36.37
(1,471)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	16	36.36
(1,198)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	7	36.36
(1,684)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	11	36.35
(1,513)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	5	36.34
(1,241)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1	36.34
(1,659)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	3	36.33
(1,231)	1:A:16:PRO:N	1:A:16:PRO:CA	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	5	36.33
(1,504)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	1	36.32
(1,218)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	5	36.32
(1,470)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1	36.31
(1,470)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	10	36.31
(1,258)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	20	36.31
(1,317)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	4	36.29
(1,638)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	10	36.28
(1,177)	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	1:A:3:PHE:CD1	2	36.28
(1,496)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	16	36.26
(1,371)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	6	36.26
(1,275)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	17	36.26
(1,551)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	6	36.24
(1,331) $(1,272)$	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	5	36.24
(1,272) $(1,287)$	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	18	36.22
(1,207) $(1,492)$	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	1:A:102:TYR:CD1	5	36.21
(1,492) $(1,619)$	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	1	36.2
(1,019)	1.71.142.1111.11	1.11.142.1111(.OA	1.11.142.1111(.OD	1.71.142.11111.001		od on nort nage



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,473)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	9	36.17
(1,259)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	7	36.17
(1,534)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	1	36.15
(1,228)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	10	36.15
(1,296)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	13	36.14
(1,571)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	12	36.1
(1,497)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	6	36.1
(1,497)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	15	36.1
(1,385)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	3	36.09
(1,379)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	6	36.09
(1,317)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	19	36.09
(1,212)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	16	36.09
(1,302)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	6	36.08
(1,646)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	19	36.06
(1,228)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	2	36.06
(1,611)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	15	36.05
(1,505)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	16	36.05
(1,473)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	4	36.05
(1,290)	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	1:A:35:PHE:CD1	5	36.04
(1,287)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	13	36.04
(1,198)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	20	36.04
(1,453)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	10	36.02
(1,362)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	8	36.02
(1,320)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	4	36.02
(1,332)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	20	36.01
(1,181)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	12	36.01
(1,217)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	12	35.98
(1,638)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	1	35.97
(1,400)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	4	35.97
(1,259)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	9	35.97
(1,347)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	13	35.96
(1,617)	1:A:141:GLU:C	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	20	35.95
(1,261)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	4	35.95
(1,554)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	15	35.93
(1,331)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	14	35.93
(1,579)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	9	35.92
(1,454)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	14	35.92
(1,569)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	1	35.91
(1,280)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	6	35.91
(1,512)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	13	35.87
(1,566)	1:A:128:SER:C	1:A:129:GLY:N	1:A:129:GLY:CA	1:A:129:GLY:C	18	35.85
(1,300) $(1,415)$	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	16	35.83
(1,350)	1:A:49:GLN:C	1:A:50:GLY:N	1:A:50:GLY:CA	1:A:50:GLY:C	1	35.82
(1,583) $(1,583)$	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	19	35.8
(1,500) $(1,510)$	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	20	35.8
(1,310) $(1,485)$	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	8	35.8
(1,483) $(1,317)$	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	16	35.8
(1,317) $(1,19)$	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	3	35.8
(1,19) $(1,407)$	1:A:20:LEU:C 1:A:71:VAL:N	1:A:21:LEU:N 1:A:71:VAL:CA	1:A:21:LEU:CA 1:A:71:VAL:CB	1:A:71:VAL:CG1	16	35.79
` ′	1:A:71:VAL:N 1:A:5:CYS:C	1:A:71:VAL:CA 1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	10	35.79 35.79
(1,192)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	18	35.79 35.77
(1,481)	1:A:90:L15:IV	1:A:90:L15:CA	1:A:90:L15:CB	1:A:90:L15:UG		35.77



Key	ed from previous pag Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
					2	, ,
(1,474)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1		35.77
(1,318)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	3	35.76
(1,250)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	6	35.76
(1,217)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1	35.76
(1,400)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	18	35.75
(1,217)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	5	35.75
(1,489)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	13	35.74
(1,366)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	7	35.73
(1,258)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	19	35.73
(1,681)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	19	35.71
(1,662)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	12	35.71
(1,594)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	10	35.71
(1,627)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	13	35.7
(1,305)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	9	35.7
(1,651)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	2	35.68
(1,371)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	11	35.68
(1,212)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	7	35.68
(1,656)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1	35.67
(1,556)	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	1:A:125:PHE:CD1	7	35.66
(1,186)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	18	35.66
(1,472)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	6	35.64
(1,366)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	12	35.64
(1,404)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	7	35.63
(1,218)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	9	35.63
(1,484)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	1	35.62
(1,372)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	12	35.62
(1,185)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	19	35.62
(1,394)	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	4	35.61
(1,258)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	11	35.61
(1,385)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	18	35.59
(1,266)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	19	35.59
(1,202)	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	1:A:7:PHE:CD1	13	35.58
(1,659)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	20	35.54
(1,569)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	6	35.54
(1,477)	1:A:93:PRO:N	1:A:93:PRO:CA	1:A:93:PRO:C	1:A:94:SER:N	10	35.54
(1,601)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	12	35.53
(1,344)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	5	35.52
(1,535)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	2	35.51
(1,183)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	10	35.5
(1,244)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1	35.49
(1,678)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	3	35.48
(1,487)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	9	35.48
(1,474)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	15	35.47
(1,440)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	11	35.47
(1,247)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	7	35.47
(1,645)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	5	35.46
(1,179)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	7	35.46
(1,507)	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	1:A:106:TYR:CD1	5	35.43
(1,201)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	20	35.43
(1,585)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	13	35.42
(1,215)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	12	35.39



	ed from previous pag		A + 9	A + 4	N/L - 1 - 1	17: -1-4: (-)
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,495)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	9	35.38
(1,285)	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	9	35.38
(1,265)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	13	35.38
(1,662)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	10	35.36
(1,537)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	12	35.36
(1,506)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	5	35.36
(1,490)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	9	35.36
(1,374)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	1	35.36
(1,677)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	17	35.35
(1,617)	1:A:141:GLU:C	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	17	35.35
(1,198)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	13	35.34
(1,229)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	11	35.32
(1,543)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	15	35.31
(1,210)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	15	35.3
(1,495)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	17	35.28
(1,383)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	18	35.26
(1,305)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	14	35.26
(1,165)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	15	35.26
(1,254)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	19	35.25
(1,208)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	7	35.24
(1,434)	1:A:79:GLY:C	1:A:80:GLY:N	1:A:80:GLY:CA	1:A:80:GLY:C	7	35.23
(1,220)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	18	35.23
(1,317)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	7	35.22
(1,472)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	18	35.2
(1,156)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:C	1:A:150:ARG:N	19	35.2
(1,473)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	11	35.19
(1,670)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	19	35.18
(1,533)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	13	35.18
(1,30)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:ALA:N	3	35.18
(1,172)	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	7	35.18
(1,590)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	14	35.15
(1,208)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	2	35.12
(1,677)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	6	35.11
(1,441)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	17	35.11
	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG		2	35.09
(1,193)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	13	35.09
(1,566)	1:A:128:SER:C	1:A:129:GLY:N	1:A:129:GLY:CA	1:A:129:GLY:C	15	35.07
(1,179)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	13	35.06
(1,673)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	19	35.05
(1,218)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	16	35.04
(1,647)	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	1:A:148:ARG:CD	13	35.01
(1,457)	1:A:86:ARG:C	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:C	10	35.01
(1,342)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:GLY:N	1:A:48:GLY:CA	1:A:48:GLY:C	13	35.0
(1,419)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	16	34.96
(1,413) $(1,231)$	1:A:16:PRO:N	1:A:16:PRO:CA	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	4	34.96
(1,231) $(1,521)$	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	7	34.94
(1,321) $(1,387)$	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	1:A:64:MET:SD	7	34.94
(1,357) $(1,457)$	1:A:86:ARG:C	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:C	19	34.93
(1,437) $(1,419)$	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	10	34.93
(1,419) $(1,628)$	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	9	34.91
(1,028) $(1,350)$	1:A:49:GLN:C	1:A:50:GLY:N	1:A:145:A5F:CA 1:A:50:GLY:CA	1:A:145:A5P:C 1:A:50:GLY:C	8	34.91
(1,300)	1.A.43.GLIV.O	1.A.50.GL1:N	1.A.JU.GLI .UA	1.A.50.GL1.C		54.91



1. ()
ation (\circ)
34.91
34.9
34.9
34.89
34.88
34.86
34.82
34.81
34.8
34.78
34.75
34.75
34.74
34.74
34.74
34.71
34.69
34.69
34.69
34.68
34.67
34.67
34.66
34.66
34.65
34.65
34.64
34.64
34.63
34.63
34.62
34.62
34.62
34.62
34.61
34.6
34.6
34.59
34.59
34.58
34.57
34.57
34.56
34.55
34.54
34.53
34.53
34.51
34.51
34.51
34.5



Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,374)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	9	34.5
(1,182)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	10	34.5
(1,309)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	16	34.49
(1,568)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	6	34.46
(1,404)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	8	34.44
(1,638)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	19	34.43
(1,611)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	20	34.42
(1,419)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	7	34.42
(1,200)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	18	34.42
(1,330)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	20	34.41
(1,265)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	19	34.41
(1,614)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	2	34.4
(1,554)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	9	34.4
(1,352)	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	9	34.4
(1,259)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	11	34.39
(1,371)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	12	34.38
(1,297)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	19	34.38
(1,600)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	20	34.37
(1,68)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:GLU:N	14	34.36
(1,492)	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	1:A:102:TYR:CD1	4	34.35
(1,481)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	2	34.35
(1,650)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	2	34.32
(1,596)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	19	34.32
(1,372)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	11	34.32
(1,344)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	11	34.32
(1,211)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	7	34.32
(1,585)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	12	34.31
(1,512)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	10	34.31
(1,479)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	7	34.31
(1,626)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	13	34.3
(1,488)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	1	34.3
(1,356)	1:A:53:PRO:N	1:A:53:PRO:CA	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	16	34.3
(1,218)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	15	34.3
(1,680)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	5	34.29
(1,659)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB		1:A:153:LEU:CD1	13	34.29
(1,457)	1:A:86:ARG:C	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:C	17	34.28
(1,374)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	18	34.28
(1,185)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	6	34.28
(1,362)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	5	34.27
(1,259)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	19	34.27
(1,19)	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	7	34.27
(1,394)	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	13	34.26
(1,174)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	13	34.26
(1,352)	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	7	34.25
(1,634)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	7	34.23
(1,473)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	2	34.23
(1,12)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:C	1:A:15:ALA:N	7	34.23
(1,352)	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	8	34.22
(1,470)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	9	34.21
(1,451)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	15	34.21
(1,407)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:CB	1:A:71:VAL:CG1	2	34.21



(1,442) (1,352) (1,168) (1,356) (1,479) (1,324) (1,685) (1,568) (1,563)	Atom-1 1:A:24:THR:N 1:A:157:GLU:C 1:A:72:GLU:N 1:A:154:MET:N 1:A:82:GLU:N 1:A:51:LYS:N 1:A:53:PRO:N 1:A:95:GLY:C 1:A:44:GLN:N 1:A:157:GLU:C 1:A:130:GLU:N 1:A:127:LEU:C	Atom-2 1:A:24:THR:CA 1:A:158:SER:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:154:MET:CA 1:A:82:GLU:CA 1:A:51:LYS:CA 1:A:1:MET:CA 1:A:53:PRO:CA 1:A:96:LYS:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:158:SER:N	Atom-3 1:A:24:THR:CB 1:A:158:SER:CA 1:A:72:GLU:CB 1:A:154:MET:C 1:A:82:GLU:CB 1:A:51:LYS:CB 1:A:1:MET:C 1:A:53:PRO:C 1:A:96:LYS:CA 1:A:44:GLN:CB	Atom-4 1:A:24:THR:OG1 1:A:158:SER:C 1:A:72:GLU:CG 1:A:155:LEU:N 1:A:82:GLU:CG 1:A:51:LYS:CG 1:A:2:ASP:N 1:A:54:SER:N 1:A:96:LYS:C	Model 5 6 9 11 16 6 9 6	Violation (∘) 34.21 34.19 34.18 34.16 34.14 34.14 34.13
(1,685) (1,410) (1,665) (1,442) (1,352) (1,168) (1,356) (1,479) (1,324) (1,685) (1,568) (1,563) (1,526)	1:A:157:GLU:C 1:A:72:GLU:N 1:A:154:MET:N 1:A:82:GLU:N 1:A:51:LYS:N 1:A:1:MET:N 1:A:53:PRO:N 1:A:95:GLY:C 1:A:44:GLN:N 1:A:157:GLU:C 1:A:130:GLU:N	1:A:158:SER:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:154:MET:CA 1:A:82:GLU:CA 1:A:51:LYS:CA 1:A:1:MET:CA 1:A:53:PRO:CA 1:A:96:LYS:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA 1:A:72:GLU:CB 1:A:154:MET:C 1:A:82:GLU:CB 1:A:51:LYS:CB 1:A:1:MET:C 1:A:53:PRO:C 1:A:96:LYS:CA	1:A:158:SER:C 1:A:72:GLU:CG 1:A:155:LEU:N 1:A:82:GLU:CG 1:A:51:LYS:CG 1:A:2:ASP:N 1:A:54:SER:N	6 9 11 16 6 9	34.19 34.18 34.16 34.14 34.14
(1,410) (1,665) (1,442) (1,352) (1,168) (1,356) (1,479) (1,324) (1,685) (1,568) (1,563) (1,566)	1:A:72:GLU:N 1:A:154:MET:N 1:A:82:GLU:N 1:A:51:LYS:N 1:A:1:MET:N 1:A:53:PRO:N 1:A:95:GLY:C 1:A:44:GLN:N 1:A:157:GLU:C 1:A:130:GLU:N	1:A:72:GLU:CA 1:A:154:MET:CA 1:A:82:GLU:CA 1:A:51:LYS:CA 1:A:1:MET:CA 1:A:53:PRO:CA 1:A:96:LYS:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:158:SER:N	1:A:72:GLU:CB 1:A:154:MET:C 1:A:82:GLU:CB 1:A:51:LYS:CB 1:A:1:MET:C 1:A:53:PRO:C 1:A:96:LYS:CA	1:A:72:GLU:CG 1:A:155:LEU:N 1:A:82:GLU:CG 1:A:51:LYS:CG 1:A:2:ASP:N 1:A:54:SER:N	9 11 16 6 9 6	34.18 34.16 34.14 34.14
(1,665) (1,442) (1,352) (1,168) (1,356) (1,479) (1,324) (1,685) (1,568) (1,563) (1,526)	1:A:154:MET:N 1:A:82:GLU:N 1:A:51:LYS:N 1:A:1:MET:N 1:A:53:PRO:N 1:A:95:GLY:C 1:A:44:GLN:N 1:A:157:GLU:C 1:A:130:GLU:N	1:A:154:MET:CA 1:A:82:GLU:CA 1:A:51:LYS:CA 1:A:1:MET:CA 1:A:53:PRO:CA 1:A:96:LYS:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:158:SER:N	1:A:154:MET:C 1:A:82:GLU:CB 1:A:51:LYS:CB 1:A:1:MET:C 1:A:53:PRO:C 1:A:96:LYS:CA	1:A:155:LEU:N 1:A:82:GLU:CG 1:A:51:LYS:CG 1:A:2:ASP:N 1:A:54:SER:N	11 16 6 9 6	34.16 34.14 34.14
(1,442) (1,352) (1,168) (1,356) (1,479) (1,324) (1,685) (1,568) (1,563) (1,563)	1:A:82:GLU:N 1:A:51:LYS:N 1:A:1:MET:N 1:A:53:PRO:N 1:A:95:GLY:C 1:A:44:GLN:N 1:A:157:GLU:C 1:A:130:GLU:N	1:A:82:GLU:CA 1:A:51:LYS:CA 1:A:1:MET:CA 1:A:53:PRO:CA 1:A:96:LYS:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:158:SER:N	1:A:82:GLU:CB 1:A:51:LYS:CB 1:A:1:MET:C 1:A:53:PRO:C 1:A:96:LYS:CA	1:A:82:GLU:CG 1:A:51:LYS:CG 1:A:2:ASP:N 1:A:54:SER:N	16 6 9 6	34.14 34.14
(1,352) (1,168) (1,356) (1,479) (1,324) (1,685) (1,568) (1,563) (1,526)	1:A:51:LYS:N 1:A:1:MET:N 1:A:53:PRO:N 1:A:95:GLY:C 1:A:44:GLN:N 1:A:157:GLU:C 1:A:130:GLU:N	1:A:51:LYS:CA 1:A:1:MET:CA 1:A:53:PRO:CA 1:A:96:LYS:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:158:SER:N	1:A:51:LYS:CB 1:A:1:MET:C 1:A:53:PRO:C 1:A:96:LYS:CA	1:A:51:LYS:CG 1:A:2:ASP:N 1:A:54:SER:N	6 9 6	34.14
(1,168) (1,356) (1,479) (1,324) (1,685) (1,568) (1,563) (1,526)	1:A:1:MET:N 1:A:53:PRO:N 1:A:95:GLY:C 1:A:44:GLN:N 1:A:157:GLU:C 1:A:130:GLU:N	1:A:1:MET:CA 1:A:53:PRO:CA 1:A:96:LYS:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:158:SER:N	1:A:1:MET:C 1:A:53:PRO:C 1:A:96:LYS:CA	1:A:2:ASP:N 1:A:54:SER:N	9 6	
(1,356) (1,479) (1,324) (1,685) (1,568) (1,563) (1,526)	1:A:53:PRO:N 1:A:95:GLY:C 1:A:44:GLN:N 1:A:157:GLU:C 1:A:130:GLU:N	1:A:53:PRO:CA 1:A:96:LYS:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:158:SER:N	1:A:53:PRO:C 1:A:96:LYS:CA	1:A:54:SER:N	6	34.13
(1,479) (1,324) (1,685) (1,568) (1,563) (1,526)	1:A:95:GLY:C 1:A:44:GLN:N 1:A:157:GLU:C 1:A:130:GLU:N	1:A:96:LYS:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:158:SER:N	1:A:96:LYS:CA			
(1,324) (1,685) (1,568) (1,563) (1,526)	1:A:44:GLN:N 1:A:157:GLU:C 1:A:130:GLU:N	1:A:44:GLN:CA 1:A:158:SER:N		1:A:96:LYS:C		34.12
(1,685) (1,568) (1,563) (1,526)	1:A:157:GLU:C 1:A:130:GLU:N	1:A:158:SER:N	1:A:44:GLN:CB		19	34.11
(1,568) (1,563) (1,526)	1:A:130:GLU:N			1:A:44:GLN:CG	6	34.1
(1,563) (1,526)			1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	17	34.09
(1,526)	1:A:127:LEU:C	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	1	34.09
· · /		1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	8	34.09
(1.248)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	1	34.09
\-;- - \-\/	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	9	34.08
(1,645)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	16	34.06
(1,400)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	12	34.06
(1,392)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	12	34.04
(1,494)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	14	34.03
(1,258)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	9	34.03
(1,255)	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	1:A:23:ARG:CD	20	34.03
(1,506)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	2	34.02
(1,429)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	9	34.02
(1,369)	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	1:A:58:PHE:CD1	6	34.02
(1,265)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	5	34.01
(1,175)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	12	33.98
(1,510)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	10	33.97
	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	11	33.96
(1,297)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	4	33.96
(1,684)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1	33.95
(1,474)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	4	33.95
(1,460)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	1	33.94
	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	20	33.92
(1,389)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	19	33.92
(1,193)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	4	33.91
(1,635)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	9	33.9
(1,572)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	12	33.9
(1,334)	1:A:45:LEU:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	19	33.9
, ,	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	5	33.87
(1,301)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	16	33.86
· /	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	18	33.86
· /	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	19	33.85
() /	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	11	33.85
(1,429)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	7	33.85
(1,551)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	1	33.84
(1,501)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	3	33.83
(1,474)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	9	33.83
(1,171) $(1,258)$	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	7	33.83
(1,215)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	5	33.83
(1,403)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	4	33.82
(1,403) $(1,19)$	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	15	33.82



Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,189)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	3	33.82
(1,535)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	18	33.81
(1,680)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	18	33.8
(1,463)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	8	33.79
(1,590)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	20	33.78
(1,415)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	5	33.78
(1,220)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	8	33.78
(1,516)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	5	33.76
(1,460)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	11	33.76
(1,494)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	12	33.75
(1,372)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	6	33.74
(1,385)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	14	33.73
(1,393)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	1	33.72
(1,561)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	5	33.71
(1,539)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	12	33.69
(1,259)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	20	33.69
(1,619)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	11	33.67
(1,512)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	5	33.66
(1,290)	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	1:A:35:PHE:CD1	4	33.66
(1,239)	1:A:18:PRO:N	1:A:18:PRO:CA	1:A:18:PRO:C	1:A:19:ALA:N	20	33.65
(1,671)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	9	33.64
(1,419)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	3	33.64
(1,642)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	20	33.63
(1,451)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	3	33.63
(1,211)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	20	33.63
(1,649)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	9	33.62
(1,531)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:CB	1:A:114:ASP:CG	13	33.62
(1,286)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	12	33.62
(1,483)	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	1:A:96:LYS:CD	6	33.61
(1,222)	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	1:A:12:LYS:CD	4	33.61
(1,512)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	8	33.59
(1,622)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	11	33.58
(1,183)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	17	33.58
(1,473)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	5	33.56
(1,399)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	3	33.56
(1,407)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:CB	1:A:71:VAL:CG1	11	33.55
(1,185)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	16	33.55
(1,512)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	12	33.54
(1,410)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	6	33.54
(1,374)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	13	33.54
(1,457)	1:A:86:ARG:C	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:C	7	33.53
(1,492)	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	1:A:102:TYR:CD1	10	33.51
(1,371)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	10	33.51
(1,251)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	15	33.51
(1,407)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:CB	1:A:71:VAL:CG1	19	33.5
(1,188)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	16	33.5
(1,390)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	13	33.49
(1,323)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	16	33.49
(1,323) $(1,224)$	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	4	33.49
(1,346)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	2	33.47
(1,647)	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	1:A:148:ARG:CD	7	33.46
(-,0-1)				1		ed on nert nage



	ed from previous pag		A		26 11	T 71 1 11 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,541)	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	1:A:118:LYS:CD	7	33.44
(1,183)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	12	33.39
(1,635)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	8	33.38
(1,330)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	8	33.37
(1,228)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	19	33.37
(1,407)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:CB	1:A:71:VAL:CG1	13	33.36
(1,536)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	7	33.35
(1,400)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	15	33.35
(1,258)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	10	33.35
(1,578)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	17	33.34
(1,446)	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	1:A:83:GLY:CA	1:A:83:GLY:C	8	33.33
(1,426)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	17	33.33
(1,663)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	4	33.31
(1,595)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	6	33.31
(1,556)	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	1:A:125:PHE:CD1	6	33.31
(1,418)	1:A:73:PHE:C	1:A:74:GLY:N	1:A:74:GLY:CA	1:A:74:GLY:C	3	33.31
(1,210)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	9	33.3
(1,453)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	12	33.28
(1,448)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	17	33.27
(1,368)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	5	33.27
(1,494)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	6	33.25
(1,347)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	6	33.25
(1,520)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	14	33.24
(1,251)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	11	33.24
(1,385)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	9	33.23
(1,183)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	3	33.23
(1,488)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	6	33.22
(1,554)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	13	33.21
(1,220)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	9	33.21
(1,669)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	9	33.2
(1,327)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	3	33.2
(1,538)	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	1:A:117:MET:SD	10	33.18
(1,535)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	19	33.18
(1,451)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	12	33.18
(1,660)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	9	33.17
(1,581)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	4	33.16
(1,294)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	8	33.16
(1,539)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	9	33.12
(1,251)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	14	33.12
(1,350)	1:A:49:GLN:C	1:A:50:GLY:N	1:A:50:GLY:CA	1:A:50:GLY:C	5	33.11
(1,535)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	12	33.1
(1,415)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	17	33.09
(1,210)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	16	33.06
(1,654)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	4	33.05
(1,575)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	4	33.05
(1,287)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	14	33.05
(1,174)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	15	33.05
(1,471)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	14	33.04
(1,403)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	15	33.04
(1,166) $(1,254)$	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	9	33.04
(1,204) $(1,211)$	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	13	33.04
(1,411)	1.A.10.GLU:N	1.A.10.GLU.UA	1.A.10.GLU.OD	1.A.10.GLU:UG		33.04



	ed from previous pag Atom-1		A + 9	A 4 4	N/L - J - 1	17:-1-4:
Key		Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,504)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	18	33.03
(1,549)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	11	33.02
(1,497)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	18	33.02
(1,483)	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	1:A:96:LYS:CD	7	33.01
(1,262)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	10	33.0
(1,164)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	18	32.99
(1,494)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	4	32.98
(1,216)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	17	32.98
(1,554)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	20	32.97
(1,451)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	2	32.96
(1,169)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	4	32.94
(1,568)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	7	32.92
(1,363)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	13	32.92
(1,658)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	2	32.91
(1,512)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	6	32.9
(1,334)	1:A:45:LEU:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	17	32.9
(1,193)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	6	32.9
(1,356)	1:A:53:PRO:N	1:A:53:PRO:CA	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	14	32.89
(1,307)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	2	32.88
(1,215)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	9	32.87
(1,578)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	3	32.85
(1,433)	1:A:78:GLU:C	1:A:79:GLY:N	1:A:79:GLY:CA	1:A:79:GLY:C	5	32.85
(1,374)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	20	32.84
(1,292)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	2	32.84
(1,568)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	16	32.82
(1,308)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	4	32.82
(1,218)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	12	32.82
(1,206)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	14	32.82
(1,403)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	20	32.81
(1,673)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	17	32.8
(1,308)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	3	32.8
(1,188)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	1	32.79
(1,634)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	6	32.78
(1,290)	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	1:A:35:PHE:CD1	3	32.78
(1,212)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	9	32.78
(1,188)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	6	32.78
(1,465)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	1	32.76
(1,405) $(1,165)$	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	3	32.76
(1,103) $(1,581)$	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	8	32.75
(1,351) $(1,251)$	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	19	32.75
(1,291) $(1,198)$	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	12	32.75
(1,198) $(1,481)$	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	19	32.73
(1,461) $(1,441)$	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	6	32.74
(1,441) $(1,223)$	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	8	32.74
(1,223) $(1,628)$	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	1	32.73
(1,628) $(1,611)$	1:A:140:ALA:C	1:A:143:ASF:N 1:A:141:GLU:N	1:A:145:A5F:CA 1:A:141:GLU:CA	1:A:143:ASF:C	4	32.73
(1,011) $(1,425)$	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:141:GLU:CA 1:A:77:VAL:CB	1:A:77:VAL:CG1	1	32.73
	1:A:77:VAL:N 1:A:23:ARG:N	1:A:77:VAL:CA 1:A:23:ARG:CA	1:A:77:VAL:CB 1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	18	32.73
(1,253)					3	
(1,356)	1:A:53:PRO:N	1:A:53:PRO:CA	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N		32.7
(1,527)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	8	32.69
(1,419)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	18	32.69



Key	$egin{array}{c} ext{ed from previous pag} \ ext{ } ext{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,352)	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	18	32.69
(1,248)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	16	32.69
(1,501)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	6	32.68
(1,383)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	16	32.68
(1,321)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	12	32.68
(1,280)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	17	32.68
(1,589)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	11	32.67
(1,448)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	9	32.67
(1,254)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	4	32.67
(1,229)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	1	32.67
(1,387)	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	1:A:64:MET:SD	8	32.66
(1,585)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	9	32.65
(1,601)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	13	32.64
(1,595)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	17	32.64
(1,387) $(1,287)$	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	8	32.64
(1,246)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	4	32.64
(1,215)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	20	32.63
(1,563)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	11	32.6
(1,363) $(1,242)$	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	20	32.6
(1,410)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	20	32.58
(1,362)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	15	32.58
(1,302) $(1,494)$	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	19	32.57
(1,434) $(1,176)$	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	5	32.57
(1,170) $(1,614)$	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	19	32.55
(1,014) $(1,404)$	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	18	32.55
(1,404) $(1,474)$	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	7	32.54
(1,474) $(1,425)$	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:CB	1:A:77:VAL:CG1	2	32.54
(1,420) $(1,460)$	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	19	32.49
(1,400) $(1,352)$	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	3	32.48
(1,302) $(1,308)$	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	8	32.48
(1,366) $(1,247)$	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	14	32.48
(1,429)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	16	32.47
(1,429) $(1,455)$	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	1:A:86:ARG:CD	8	32.46
(1,433) $(1,410)$	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	1	32.46
(1,347)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	1	32.46
(1,347) $(1,411)$	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	15	32.45
(1,186)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	19	32.45
(1,180) $(1,651)$	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	20	32.43
(1,031) $(1,243)$	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	10	32.44
(1,243) $(1,179)$	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	15	32.44
(1,179) $(1,390)$	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	14	32.44
(1,671)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	2	32.43
(1,613)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	16	32.42
(1,013) $(1,410)$	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	14	32.42
(1,410) $(1,310)$	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	20	32.42
(1,310) $(1,254)$	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	20	32.42
(1,234) $(1,407)$	1:A:71:VAL:N	1:A:25:ARG:CA 1:A:71:VAL:CA	1:A:25:ARG:CB 1:A:71:VAL:CB	1:A:71:VAL:CG1	18	32.41
(1,407) $(1,188)$	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	5	32.4
(1,188)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA 1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	4	32.39
(1,188) $(1,318)$	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	6	32.38
(1,318) $(1,296)$	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	11	32.37
(1,490)	1.A.93.1 1 R.W	1.A.39.11N.UA	1.A.99.11R.UD	1.A.39.11A.UG	11	04.01



	ed from previous pag		Atom 2	Atom 1	Model	Violetien (a)
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,451)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	11	32.36
(1,350)	1:A:49:GLN:C	1:A:50:GLY:N	1:A:50:GLY:CA	1:A:50:GLY:C	20	32.36
(1,383)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	5	32.34
(1,250)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	7	32.34
(1,521)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	20	32.33
(1,480)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	3	32.33
(1,266)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	7	32.33
(1,575)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	12	32.32
(1,540)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	6	32.32
(1,510)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	14	32.32
(1,585)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	10	32.31
(1,385)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	15	32.31
(1,650)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	17	32.3
(1,603)	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:CB	1:A:138:ASN:CG	9	32.3
(1,399)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	20	32.3
(1,404)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	6	32.28
(1,477)	1:A:93:PRO:N	1:A:93:PRO:CA	1:A:93:PRO:C	1:A:94:SER:N	6	32.27
(1,367)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	10	32.27
(1,650)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	3	32.26
(1,678)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	10	32.25
(1,649)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	20	32.25
(1,483)	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	1:A:96:LYS:CD	1	32.25
(1,484)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	2	32.24
(1,442)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	15	32.23
(1,383)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	12	32.23
(1,650)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	1	32.22
(1,454)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	6	32.22
(1,362)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	20	32.22
(1,176)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	11	32.21
(1,172)	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	12	32.21
(1,258)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	17	32.2
(1,543)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	6	32.19
(1,645)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	14	32.18
(1,199)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	15	32.18
(1,520)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	2	32.16
(1,506)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	8	32.15
(1,483)	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	1:A:96:LYS:CD	10	32.15
(1,242)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	6	32.15
(1,188)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	2	32.15
(1,440)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	13	32.14
(1,489)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	17	32.13
(1,414)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	19	32.13
(1,292)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	9	32.13
(1,621)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	11	32.11
(1,540)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	1	32.11
(1,543)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	13	32.1
(1,575)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	10	32.08
(1,253)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	11	32.08
(1,19)	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	9	32.08
(1,592)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	7	32.07
(1,344)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	2	32.07



Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,275)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	9	32.04
(1,223)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	13	32.04
(1,536)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	2	32.02
(1,367)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	12	32.02
(1,620)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	20	32.01
(1,608)	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	1:A:140:ALA:CA	1:A:140:ALA:C	16	32.01
(1,603)	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:CB	1:A:138:ASN:CG	10	31.94
(1,395)	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	19	31.94
(1,257)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	15	31.9
(1,344)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	18	31.89
(1,212)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	15	31.89
(1,651)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	19	31.88
(1,484)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	4	31.88
(1,324)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	5	31.88
(1,297)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	15	31.88
(1,292)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	1	31.87
(1,425)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:CB	1:A:77:VAL:CG1	10	31.86
(1,19)	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	16	31.85
(1,407)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:CB	1:A:71:VAL:CG1	7	31.83
(1,165)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	9	31.83
(1,674)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	14	31.79
(1,537)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	20	31.79
(1,229)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	4	31.79
(1,367)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	15	31.77
(1,262)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	15	31.77
(1,211)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	4	31.75
(1,366)	1:A:57:PRO:N	1:A:57:PRO:CA	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	18	31.74
(1,535)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	11	31.73
(1,628)	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	4	31.72
(1,558)	1:A:126:ASP:N	1:A:126:ASP:CA	1:A:126:ASP:CB	1:A:126:ASP:CG	10	31.71
(1,263)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	12	31.71
(1,32)	1:A:27:ALA:N	1:A:27:ALA:CA	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	19	31.7
(1,211)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	17	31.7
(1,374)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	14	31.69
(1,594)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	15	31.68
(1,412)	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	1:A:72:GLU:CD	18	31.67
(1,677)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	5	31.65
(1,323)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	13	31.65
(1,536)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	11	31.64
(1,495)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	20	31.64
(1,494)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	7	31.62
(1,287)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	17	31.62
(1,568)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	10	31.61
(1,224)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	5	31.6
(1,470)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	6	31.59
(1,412)	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	1:A:72:GLU:CD	10	31.59
(1,242)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	9	31.58
(1,208)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	3	31.58
(1,448)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	2	31.56
(1,314)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	17	31.55
(1,673)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	11	31.54



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,212)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	19	31.54
(1,357)	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	10	31.53
(1,659)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	12	31.52
(1,578)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	18	31.51
(1,481)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	1	31.51
(1,410)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	13	31.51
(1,347)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	17	31.51
(1,218)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	2	31.51
(1,450)	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	1:A:85:GLY:CA	1:A:85:GLY:C	5	31.49
(1,207)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	20	31.49
(1,324)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	7	31.48
(1,248)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	3	31.47
(1,162)	1:A:152:SER:N	1:A:152:SER:CA	1:A:152:SER:C	1:A:153:LEU:N	18	31.44
(1,537)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	10	31.43
(1,477)	1:A:93:PRO:N	1:A:93:PRO:CA	1:A:93:PRO:C	1:A:94:SER:N	8	31.42
(1,242)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	11	31.42
(1,214)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	11	31.41
(1,644)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	1:A:148:ARG:N	17	31.4
(1,290)	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	1:A:35:PHE:CD1	12	31.39
(1,450)	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	1:A:85:GLY:CA	1:A:85:GLY:C	18	31.37
(1,654)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	16	31.34
(1,627)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	14	31.34
(1,608)	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	1:A:140:ALA:CA	1:A:140:ALA:C	9	31.34
(1,342)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:GLY:N	1:A:48:GLY:CA	1:A:48:GLY:C	12	31.34
(1,282)	1:A:31:LEU:C	1:A:32:GLY:N	1:A:32:GLY:CA	1:A:32:GLY:C	18	31.34
(1,266)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	10	31.34
(1,200)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	14	31.34
(1,679)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	8	31.31
(1,239)	1:A:18:PRO:N	1:A:18:PRO:CA	1:A:18:PRO:C	1:A:19:ALA:N	16	31.31
(1,314)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	8	31.29
(1,301)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	10	31.29
(1,286)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	1	31.29
(1,220)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	16	31.29
(1,223)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	3	31.28
(1,229)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	13	31.27
(1,651)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	14	31.26
(1,613)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	17	31.26
(1,578)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	7	31.26
(1,372)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	15	31.26
(1,301)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	1	31.26
(1,301) $(1,247)$	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	15	31.24
(1,540)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	16	31.22
(1,340) $(1,450)$	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	1:A:85:GLY:CA	1:A:85:GLY:C	17	31.22
(1,430) $(1,643)$	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	8	31.21
(1,425)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:CB	1:A:77:VAL:CG1	19	31.21
(1,423) $(1,218)$	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	7	31.2
(1,218) $(1,186)$	1:A:11:LEU:CA 1:A:4:GLU:C	1:A:11:LEU:CB 1:A:5:CYS:N	1:A:11:LEU:CG 1:A:5:CYS:CA	1:A:1::LEU:CD1 1:A:5:CYS:C	12	31.2
(1,180) $(1,506)$	1:A:4:GLU:C 1:A:106:TYR:N	1:A:5:C15:N 1:A:106:TYR:CA	1:A:3:C15:CA 1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	7	31.17
(1,670)	1:A:100:1 1 K:N 1:A:155:LEU:CA	1:A:100:14 K:CA 1:A:155:LEU:CB	1:A:100:1 1 K:CB 1:A:155:LEU:CG	1:A:100:111K:CG 1:A:155:LEU:CD1	7	31.16
(1,370) $(1,331)$	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	8	31.15
(1,331) $(1,614)$	1:A:45:LEU:CA 1:A:141:GLU:N	1:A:43:LEU:CB 1:A:141:GLU:CA	1:A:43:LEU:CG 1:A:141:GLU:CB	1:A:45:LEU:CD1 1:A:141:GLU:CG	15	31.14
(1,014)	1.A.141.GLU.N	1.A.141.GLU.UA	1.A.141.GLU:OD	1.A.141.GLU:UG		31.14



	ed from previous pag				36 11	T70 1 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,628)	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	5	31.13
(1,543)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	10	31.13
(1,281)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	15	31.13
(1,243)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	18	31.12
(1,526)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	3	31.11
(1,434)	1:A:79:GLY:C	1:A:80:GLY:N	1:A:80:GLY:CA	1:A:80:GLY:C	8	31.11
(1,535)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	8	31.09
(1,451)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	4	31.09
(1,332)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	5	31.09
(1,223)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	14	31.09
(1,313)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	6	31.08
(1,471)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	4	31.07
(1,212)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	18	31.06
(1,166)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	4	31.06
(1,390)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	4	31.05
(1,446)	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	1:A:83:GLY:CA	1:A:83:GLY:C	16	31.04
(1,566)	1:A:128:SER:C	1:A:129:GLY:N	1:A:129:GLY:CA	1:A:129:GLY:C	3	31.03
(1,495)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	13	31.03
(1,173)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	11	31.03
(1,628)	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	11	31.01
(1,608)	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	1:A:140:ALA:CA	1:A:140:ALA:C	20	31.01
(1,674)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	2	31.0
(1,471)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	1	31.0
(1,410)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	4	31.0
(1,389)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	3	31.0
(1,173)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	20	30.97
(1,563)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	2	30.96
(1,658)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	6	30.95
(1,423)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	6	30.95
(1,404)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	5	30.95
(1,222)	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	1:A:12:LYS:CD	14	30.94
(1,166)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	1	30.9
(1,460)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	15	30.89
(1,166)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	20	30.87
(1,643)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	19	30.86
(1,535)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	15	30.86
(1,346)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	10	30.86
(1,200)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	5	30.86
(1,608)	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	1:A:140:ALA:CA	1:A:140:ALA:C	15	30.85
(1,300)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	14	30.85
(1,183)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	19	30.85
(1,650)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	18	30.84
(1,594)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	14	30.84
(1,628)	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	12	30.83
(1,626)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	3	30.83
(1,374)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	5	30.81
(1,337)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	10	30.81
(1,337) $(1,223)$	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	17	30.81
(1,223) $(1,185)$	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:5:CYS:N	8	30.8
(1,185) $(1,425)$	1:A:4:GLU:N 1:A:77:VAL:N	1:A:4:GLU:CA 1:A:77:VAL:CA	1:A:4:GLU:C 1:A:77:VAL:CB	1:A:5:C15:N 1:A:77:VAL:CG1	8	30.79
· · /		1:A:77:VAL:CA 1:A:3:PHE:CA	1:A:77:VAL:CB 1:A:3:PHE:CB	1:A:7:VAL:CG1 1:A:3:PHE:CG	14	30.79
(1,175)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:UA	T:A:3:PHE:UB	1:A:3:PHE:UG		30.78



	ed from previous pag				3.5.1.1	T7. 1 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,308)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	7	30.75
(1,185)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	17	30.75
(1,419)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	1	30.73
(1,404)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	2	30.73
(1,670)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	17	30.71
(1,181)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	5	30.71
(1,483)	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	1:A:96:LYS:CD	12	30.7
(1,354)	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	1:A:51:LYS:CD	9	30.69
(1,623)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	7	30.67
(1,660)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	4	30.66
(1,628)	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	13	30.65
(1,578)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	12	30.65
(1,516)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	4	30.64
(1,264)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	13	30.62
(1,608)	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	1:A:140:ALA:CA	1:A:140:ALA:C	10	30.61
(1,474)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	18	30.61
(1,494)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	5	30.6
(1,454)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	5	30.6
(1,188)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	8	30.6
(1,451)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	18	30.59
(1,404)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	17	30.58
(1,350)	1:A:49:GLN:C	1:A:50:GLY:N	1:A:50:GLY:CA	1:A:50:GLY:C	2	30.57
(1,162)	1:A:152:SER:N	1:A:152:SER:CA	1:A:152:SER:C	1:A:153:LEU:N	8	30.56
(1,367)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	8	30.55
(1,254)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	17	30.55
(1,156)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:C	1:A:150:ARG:N	17	30.55
(1,674)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	18	30.54
(1,434)	1:A:79:GLY:C	1:A:80:GLY:N	1:A:80:GLY:CA	1:A:80:GLY:C	3	30.54
(1,248)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	4	30.54
(1,682)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	11	30.53
(1,660)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	7	30.53
(1,372)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	5	30.52
(1,344)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	14	30.51
(1,664)	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	1:A:154:MET:SD	3	30.49
(1,537)	1:A:117:MET:N		I .	1:A:117:MET:CG	6	30.47
(1,608)	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	1:A:140:ALA:CA	1:A:140:ALA:C	1	30.46
(1,297)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	8	30.46
(1,183)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	16	30.46
(1,536)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	14	30.45
(1,327)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	4	30.45
(1,327) $(1,285)$	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	10	30.45
(1,242)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	13	30.45
(1,242) $(1,183)$	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	20	30.45
(1,163) $(1,541)$	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	1:A:118:LYS:CD	5	30.44
(1,341) $(1,223)$	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	1	30.44
(1,223) $(1,162)$	1:A:15:GEU:N 1:A:152:SER:N	1:A:152:SER:CA	1:A:152:SER:C	1:A:15:GLU:CG 1:A:153:LEU:N	11	30.44
(1,162) $(1,638)$	1:A:146:GLN:C	1:A:132:SER:CA 1:A:147:LEU:N	1:A:132:SER:C 1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	18	30.43
(1,038) $(1,580)$	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	15	30.43
(1,380) $(1,454)$	1:A:154:ILE:N 1:A:86:ARG:N	1:A:154:1LE:CA 1:A:86:ARG:CA	1:A:154:ILE:CB 1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	10	30.43
, , ,	1:A:39:PRO:C	1:A:80:ARG:CA 1:A:140:ALA:N	1:A:80:ARG:CB 1:A:140:ALA:CA	1:A:80:ARG:CG 1:A:140:ALA:C	14	30.42
(1,608)	1:A:78:GLU:N	1:A:140:ALA:N 1:A:78:GLU:CA	1:A:140:ALA:CA 1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	20	30.41
(1,429)	1:A:70:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:CB	1:A:76:GLU:UG		30.41



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,583)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	15	30.4
(1,491)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	20	30.4
(1,654)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	19	30.39
(1,595)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	19	30.38
(1,407)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:CB	1:A:71:VAL:CG1	3	30.38
(1,224)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	19	30.37
(1,608)	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	1:A:140:ALA:CA	1:A:140:ALA:C	13	30.36
(1,455)	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	1:A:86:ARG:CD	16	30.35
(1,585)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	3	30.34
(1,302)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	9	30.34
(1,263)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	4	30.33
(1,585)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	19	30.3
(1,608)	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	1:A:140:ALA:CA	1:A:140:ALA:C	18	30.27
(1,323)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	10	30.26
(1,292)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	10	30.26
(1,275)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	15	30.26
(1,164)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	2	30.26
(1,188)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	18	30.25
(1,352)	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	4	30.24
(1,451)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	20	30.23
(1,297)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	5	30.23
(1,608)	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	1:A:140:ALA:CA	1:A:140:ALA:C	12	30.21
(1,425)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:CB	1:A:77:VAL:CG1	3	30.21
(1,296)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	12	30.21
(1,165)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	17	30.21
(1,537)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	13	30.2
(1,628)	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	8	30.19
(1,488)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	7	30.18
(1,477)	1:A:93:PRO:N	1:A:93:PRO:CA	1:A:93:PRO:C	1:A:94:SER:N	3	30.18
(1,111) $(1,19)$	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	18	30.17
(1,608)	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	1:A:140:ALA:CA	1:A:140:ALA:C	2	30.16
(1,387)	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	1:A:64:MET:SD	1	30.16
(1,387) $(1,286)$	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	9	30.16
(1,230) $(1,671)$	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	3	30.15
	1:A:153:LEU:CA			1:A:153:LEU:CD1	16	30.15
(1,318)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	4	30.15
(1,545)	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:CB	1:A:120:VAL:CG1	13	30.14
(1,343) $(1,481)$	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	11	30.14
(1,481) $(1,248)$	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	13	30.12
(1,248) $(1,682)$	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	15	30.11
(1,682) $(1,628)$	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	3	30.11
(1,028) $(1,407)$	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:CB	1:A:71:VAL:CG1	5	30.11
(1,407) $(1,223)$	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG		30.1
(' /	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	7	30.09
(1,628)	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ASP:N 1:A:140:ALA:N	1:A:145:ASP:CA 1:A:140:ALA:CA	1:A:140:ASP:C 1:A:140:ALA:C	19	30.09
(1,608)	1:A:139:PRO:C 1:A:147:LEU:CA	1:A:140:ALA:N 1:A:147:LEU:CB	1:A:140:ALA:CA 1:A:147:LEU:CG	1:A:140:ALA:C 1:A:147:LEU:CD1	11	30.09
(1,642) $(1,536)$	1:A:147:LEU:CA 1:A:117:MET:N	1:A:147:LEU:CB 1:A:117:MET:CA	1:A:147:LEU:CG 1:A:117:MET:CB	1:A:147:LEU:CD1 1:A:117:MET:CG	4	30.08
· · /	1:A:117:ME1:N 1:A:156:HIS:C	1:A:117:ME1:CA 1:A:157:GLU:N	1:A:117:ME1:CB 1:A:157:GLU:CA	1:A:117:ME1:CG 1:A:157:GLU:C	14	30.08
(1,679)					3	
(1,622)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C		30.07
(1,243)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	14	30.07
(1,200)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	16	30.07



	ed from previous pag		A / 0	A	3.6 1.1	T 7* 1 4* ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,176)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	15	30.07
(1,671)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	16	30.06
(1,628)	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	17	30.06
(1,677)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	14	30.05
(1,628)	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	10	30.05
(1,12)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:C	1:A:15:ALA:N	6	30.04
(1,643)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	6	30.03
(1,337)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	18	30.03
(1,572)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	16	30.01
(1,450)	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	1:A:85:GLY:CA	1:A:85:GLY:C	19	30.0
(1,19)	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	6	30.0
(1,266)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	14	29.99
(1,525)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	2	29.97
(1,344)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	3	29.97
(1,336)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	18	29.97
(1,331)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	16	29.95
(1,379)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	1	29.94
(1,248)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	15	29.94
(1,418)	1:A:73:PHE:C	1:A:74:GLY:N	1:A:74:GLY:CA	1:A:74:GLY:C	11	29.93
(1,654)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	17	29.92
(1,643)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	11	29.92
(1,537)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	4	29.92
(1,410)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	11	29.92
(1,321)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	3	29.92
(1,262)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	12	29.92
(1,183)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	5	29.92
(1,494)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1	29.91
(1,385)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	4	29.91
(1,528)	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	1:A:113:TYR:CD1	1	29.9
(1,331)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	11	29.9
(1,269)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	11	29.9
(1,327)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	15	29.88
(1,165)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	13	29.88
(1,660)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	10	29.87
(1,626)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	11	29.87
(1,568)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	4	29.87
(1,206)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	9	29.86
(1,670)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	3	29.85
(1,173)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	9	29.85
(1,537)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	5	29.84
(1,369)	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	1:A:58:PHE:CD1	3	29.84
(1,266)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	18	29.84
(1,220)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	15	29.84
(1,518)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	12	29.83
(1,371)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	16	29.83
(1,190)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	8	29.83
(1,190) $(1,619)$	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	16	29.82
(1,601)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	16	29.82
(1,587)	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	1:A:135:TYR:CD1	20	29.82
(1,387) $(1,483)$	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	1:A:96:LYS:CD	4	29.81
(1,403) $(1,419)$	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	9	29.81
(1,419)	1.A.(0.F11E:N	1.A.10.F HE:UA	1.A.(0.FHE.OD	1.A. (J.F HE:OG		29.01



(1,222) 1:A:12:LYS:CA 1:A:12:LYS:CB 1:A:12:LYS:CG 1:A:12:LYS:CD 18 (1,535) 1:A:116:LEU:CA 1:A:116:LEU:CB 1:A:116:LEU:CG 1:A:116:LEU:CD1 20 (1,442) 1:A:82:GLU:N 1:A:82:GLU:CA 1:A:82:GLU:CB 1:A:82:GLU:CG 9 (1,357) 1:A:53:PRO:C 1:A:54:SER:N 1:A:54:SER:CA 1:A:54:SER:C 6 (1,297) 1:A:39:TYR:N 1:A:39:TYR:CA 1:A:39:TYR:CB 1:A:39:TYR:CG 12 (1,206) 1:A:8:VAL:N 1:A:8:VAL:CA 1:A:8:VAL:CB 1:A:8:VAL:CG1 3 (1,540) 1:A:118:LYS:N 1:A:118:LYS:CA 1:A:118:LYS:CB 1:A:118:LYS:CG 14 (1,296) 1:A:39:TYR:N 1:A:39:TYR:CA 1:A:39:TYR:CB 1:A:39:TYR:CG 5 (1,244) 1:A:21:LEU:CN 1:A:21:LEU:CA 1:A:21:LEU:CB 1:A:31:LEU:CG 6 (1,472) 1:A:91:LEU:CA 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CD 1 1 (1,280) 1:A:31:LEU:CA 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CD 1 <th>29.81 29.8 29.79 29.79 29.79 29.79 29.77 29.77 29.77 29.76 29.76 29.75 29.74 29.74 29.74 29.73 29.73 29.73 29.72</th>	29.81 29.8 29.79 29.79 29.79 29.79 29.77 29.77 29.77 29.76 29.76 29.75 29.74 29.74 29.74 29.73 29.73 29.73 29.72
(1,535) 1:A:116:LEU:CA 1:A:116:LEU:CB 1:A:116:LEU:CG 1:A:116:LEU:CD1 20 (1,442) 1:A:82:GLU:N 1:A:82:GLU:CA 1:A:82:GLU:CB 1:A:82:GLU:CG 9 (1,357) 1:A:53:PRO:C 1:A:54:SER:N 1:A:54:SER:CA 1:A:454:SER:C 6 (1,297) 1:A:39:TYR:N 1:A:39:TYR:CA 1:A:39:TYR:CB 1:A:39:TYR:CG 12 (1,206) 1:A:8:VAL:N 1:A:8:VAL:CA 1:A:8:VAL:CB 1:A:8:VAL:CG1 3 (1,540) 1:A:118:LYS:N 1:A:118:LYS:CA 1:A:118:LYS:CB 1:A:118:LYS:CG 14 (1,296) 1:A:39:TYR:N 1:A:39:TYR:CA 1:A:39:TYR:CB 1:A:39:TYR:CG 5 (1,244) 1:A:21:LEU:N 1:A:39:TYR:CA 1:A:39:TYR:CB 1:A:39:TYR:CG 5 (1,472) 1:A:39:TYR:N 1:A:39:TYR:CA 1:A:39:TYR:CB 1:A:411:LEU:CG 6 (1,472) 1:A:39:LEU:CA 1:A:49:LEU:CB 1:A:411:LEU:CB 1:A:411:LEU:CD 1 (1,280) 1:A:31:LEU:CA 1:A:11:LEU:CB 1:A:31:LEU:CG 1:A:31:LEU:CD1	29.8 29.79 29.79 29.79 29.77 29.77 29.77 29.76 29.76 29.75 29.74 29.74 29.74 29.73 29.73
(1,442) 1:A:82:GLU:N 1:A:82:GLU:CA 1:A:82:GLU:CB 1:A:82:GLU:CG 9 (1,357) 1:A:53:PRO:C 1:A:54:SER:N 1:A:54:SER:CA 1:A:54:SER:C 6 (1,297) 1:A:39:TYR:N 1:A:39:TYR:CA 1:A:39:TYR:CB 1:A:39:TYR:CG 12 (1,206) 1:A:8:VAL:N 1:A:8:VAL:CA 1:A:8:VAL:CB 1:A:8:VAL:CG1 3 (1,540) 1:A:118:LYS:N 1:A:118:LYS:CA 1:A:118:LYS:CB 1:A:118:LYS:CG 14 (1,296) 1:A:39:TYR:N 1:A:39:TYR:CA 1:A:39:TYR:CB 1:A:39:TYR:CG 5 (1,244) 1:A:21:LEU:N 1:A:21:LEU:CA 1:A:49:LEU:CB 1:A:39:TYR:CG 5 (1,244) 1:A:21:LEU:CA 1:A:39:LEU:CB 1:A:49:LEU:CB 1:A:39:LEU:CD 5 (1,244) 1:A:21:LEU:CA 1:A:31:LEU:CB 1:A:41:LEU:CB 1:A:31:LEU:CD 5 (1,218) 1:A:31:LEU:CA 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CG 1:A:31:LEU:CD1 1 (1,280) 1:A:31:LEU:CA 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CB 1:A:47:VAL:CB 1:A:47:VA	29.79 29.79 29.79 29.77 29.77 29.77 29.76 29.76 29.75 29.74 29.74 29.74 29.73 29.73
(1,357) 1:A:53:PRO:C 1:A:54:SER:N 1:A:54:SER:CA 1:A:54:SER:C 6 (1,297) 1:A:39:TYR:N 1:A:39:TYR:CA 1:A:39:TYR:CB 1:A:39:TYR:CG 12 (1,206) 1:A:8:VAL:N 1:A:8:VAL:CA 1:A:8:VAL:CB 1:A:39:TYR:CG 3 (1,540) 1:A:118:LYS:N 1:A:118:LYS:CA 1:A:118:LYS:CB 1:A:118:LYS:CG 14 (1,296) 1:A:39:TYR:N 1:A:39:TYR:CA 1:A:39:TYR:CB 1:A:39:TYR:CG 5 (1,244) 1:A:21:LEU:N 1:A:21:LEU:CA 1:A:21:LEU:CB 1:A:31:LEU:CG 6 (1,472) 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:CB 1:A:91:LEU:CD 5 (1,218) 1:A:11:LEU:CA 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CG 1:A:31:LEU:CD1 1 (1,280) 1:A:31:LEU:CA 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CG 1:A:31:LEU:CD1 3 (1,425) 1:A:77:VAL:N 1:A:44:GLN:N 1:A:44:GLN:C 1:A:44:GLN:C 17 (1,207) 1:A:9:CYS:N 1:A:9:CYS:CA 1:A:19:CYS:CB 1:A:19:CYS:CB 1:A:49:CYS:CB 1:A:49:CYS:CB	29.79 29.79 29.79 29.77 29.77 29.76 29.76 29.75 29.74 29.74 29.74 29.73 29.73
(1,297) 1:A:39:TYR:N 1:A:39:TYR:CA 1:A:39:TYR:CB 1:A:39:TYR:CG 12 (1,206) 1:A:8:VAL:N 1:A:8:VAL:CA 1:A:8:VAL:CB 1:A:8:VAL:CG1 3 (1,540) 1:A:118:LYS:N 1:A:118:LYS:CA 1:A:118:LYS:CB 1:A:118:LYS:CG 14 (1,296) 1:A:39:TYR:N 1:A:39:TYR:CA 1:A:39:TYR:CB 1:A:39:TYR:CG 5 (1,244) 1:A:21:LEU:N 1:A:21:LEU:CA 1:A:21:LEU:CB 1:A:21:LEU:CG 6 (1,472) 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:CB 1:A:91:LEU:CD 5 (1,218) 1:A:11:LEU:CA 1:A:11:LEU:CB 1:A:11:LEU:CD 1 (1,280) 1:A:31:LEU:CA 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CD 3 (1,425) 1:A:77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:CB 1:A:77:VAL:CG1 5 (1,321) 1:A:43:LEU:C 1:A:44:GLN:N 1:A:44:GLN:C 17 (1,207) 1:A:9:CYS:N 1:A:9:CYS:CB 1:A:155:LEU:N 18 (1,327) 1:A:44:GMET:N 1:A:45:LEU:C 1:A:45:LEU:C 1:A:138:ASN	29.79 29.79 29.77 29.77 29.76 29.76 29.75 29.74 29.74 29.74 29.73 29.73 29.73
(1,206) 1:A:8:VAL:N 1:A:8:VAL:CA 1:A:8:VAL:CB 1:A:8:VAL:CG1 3 (1,540) 1:A:118:LYS:N 1:A:118:LYS:CA 1:A:118:LYS:CB 1:A:118:LYS:CG 14 (1,296) 1:A:39:TYR:N 1:A:39:TYR:CA 1:A:39:TYR:CB 1:A:39:TYR:CG 5 (1,244) 1:A:21:LEU:N 1:A:21:LEU:CA 1:A:21:LEU:CB 1:A:21:LEU:CG 6 (1,472) 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:CB 1:A:91:LEU:CG 1:A:91:LEU:CD1 5 (1,218) 1:A:11:LEU:CA 1:A:11:LEU:CB 1:A:11:LEU:CG 1:A:11:LEU:CD1 1 (1,280) 1:A:31:LEU:CA 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CG 1:A:31:LEU:CD1 3 (1,425) 1:A:77:VAL:N 1:A:77:VAL:CB 1:A:77:VAL:CG1 5 (1,321) 1:A:43:LEU:C 1:A:44:GLN:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:44:GLN:C 17 (1,207) 1:A:9:CYS:N 1:A:9:CYS:CA 1:A:9:CYS:CB 1:A:9:CYS:SG 12 (1,665) 1:A:154:MET:N 1:A:45:LEU:N 1:A:45:LEU:CA 1:A:45:LEU:C 11 (1,	29.77 29.77 29.76 29.76 29.75 29.74 29.74 29.74 29.73 29.73 29.73
(1,540) 1:A:118:LYS:N 1:A:118:LYS:CA 1:A:118:LYS:CB 1:A:118:LYS:CG 14 (1,296) 1:A:39:TYR:N 1:A:39:TYR:CA 1:A:39:TYR:CB 1:A:39:TYR:CG 5 (1,244) 1:A:21:LEU:N 1:A:21:LEU:CA 1:A:21:LEU:CB 1:A:21:LEU:CG 6 (1,472) 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:CB 1:A:91:LEU:CG 1:A:91:LEU:CD1 5 (1,218) 1:A:11:LEU:CA 1:A:11:LEU:CB 1:A:11:LEU:CG 1:A:11:LEU:CD1 1 (1,280) 1:A:31:LEU:CA 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CG 1:A:31:LEU:CD1 3 (1,425) 1:A:77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:CB 1:A:77:VAL:CG1 5 (1,321) 1:A:43:LEU:C 1:A:44:GLN:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:44:GLN:C 17 (1,207) 1:A:9:CYS:N 1:A:9:CYS:CA 1:A:9:CYS:CB 1:A:155:LEU:N 18 (1,327) 1:A:44:GLN:C 1:A:45:LEU:N 1:A:45:LEU:CA 1:A:45:LEU:C 11 (1,263) 1:A:27:ALA:C 1:A:138:ASN:N 1:A:138:ASN:CA 1:A:138:ASN:C 20 <td>29.77 29.77 29.76 29.76 29.75 29.74 29.74 29.74 29.73 29.73 29.73</td>	29.77 29.77 29.76 29.76 29.75 29.74 29.74 29.74 29.73 29.73 29.73
(1,244) 1:A:21:LEU:N 1:A:21:LEU:CA 1:A:21:LEU:CB 1:A:21:LEU:CG 6 (1,472) 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:CB 1:A:91:LEU:CG 1:A:91:LEU:CD1 5 (1,218) 1:A:11:LEU:CA 1:A:11:LEU:CB 1:A:11:LEU:CG 1:A:11:LEU:CD1 1 (1,280) 1:A:31:LEU:CA 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CG 1:A:31:LEU:CD1 3 (1,425) 1:A:77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:CB 1:A:77:VAL:CG1 5 (1,321) 1:A:43:LEU:C 1:A:44:GLN:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:44:GLN:C 17 (1,207) 1:A:9:CYS:N 1:A:9:CYS:CA 1:A:9:CYS:CB 1:A:9:CYS:SG 12 (1,665) 1:A:154:MET:N 1:A:154:MET:CA 1:A:154:MET:C 1:A:155:LEU:N 18 (1,327) 1:A:44:GLN:C 1:A:45:LEU:N 1:A:28:MET:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CB 1:A:138:ASN:CA 1:A:338:ASN:C 20 (1,601) 1:A:137:ASP:C 1:A:138:ASN:N 1:A:147:LEU:CG 1:A:147:LEU:CD1 16 (1,571) 1:A:132:TYR:N 1:	29.77 29.76 29.76 29.75 29.74 29.74 29.74 29.73 29.73 29.73
(1,472) 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:CB 1:A:91:LEU:CG 1:A:91:LEU:CD1 5 (1,218) 1:A:11:LEU:CA 1:A:11:LEU:CB 1:A:11:LEU:CG 1:A:11:LEU:CD1 1 (1,280) 1:A:31:LEU:CA 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CG 1:A:31:LEU:CD1 3 (1,425) 1:A:77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:CB 1:A:77:VAL:CG1 5 (1,321) 1:A:43:LEU:C 1:A:44:GLN:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:44:GLN:C 17 (1,207) 1:A:9:CYS:N 1:A:9:CYS:CA 1:A:9:CYS:CB 1:A:9:CYS:SG 12 (1,665) 1:A:154:MET:N 1:A:154:MET:CA 1:A:154:MET:C 1:A:155:LEU:N 18 (1,327) 1:A:44:GLN:C 1:A:45:LEU:N 1:A:45:LEU:CA 1:A:45:LEU:C 11 (1,263) 1:A:27:ALA:C 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:C 6 (1,601) 1:A:137:ASP:C 1:A:138:ASN:N 1:A:138:ASN:CA 1:A:138:ASN:C 20 (1,643) 1:A:132:TYR:N 1:A:132:TYR:CA 1:A:132:TYR:CB 1:A:132:TYR:CG 4 <td>29.76 29.76 29.75 29.74 29.74 29.74 29.73 29.73 29.73</td>	29.76 29.76 29.75 29.74 29.74 29.74 29.73 29.73 29.73
(1,218) 1:A:11:LEU:CA 1:A:11:LEU:CB 1:A:11:LEU:CG 1:A:11:LEU:CD1 1 (1,280) 1:A:31:LEU:CA 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CG 1:A:31:LEU:CD1 3 (1,425) 1:A:77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:CB 1:A:77:VAL:CG1 5 (1,321) 1:A:43:LEU:C 1:A:44:GLN:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:44:GLN:C 17 (1,207) 1:A:9:CYS:N 1:A:9:CYS:CB 1:A:9:CYS:SG 12 (1,665) 1:A:154:MET:N 1:A:154:MET:C 1:A:155:LEU:N 18 (1,327) 1:A:44:GLN:C 1:A:45:LEU:N 1:A:45:LEU:CA 1:A:45:LEU:C 11 (1,263) 1:A:27:ALA:C 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:C 6 (1,601) 1:A:137:ASP:C 1:A:138:ASN:N 1:A:138:ASN:CA 1:A:138:ASN:C 20 (1,643) 1:A:147:LEU:CA 1:A:147:LEU:CB 1:A:147:LEU:CG 1:A:147:LEU:CD1 16 (1,571) 1:A:132:TYR:N 1:A:84:SER:N 1:A:84:SER:CA 1:A:84:SER:C 13	29.76 29.75 29.74 29.74 29.74 29.73 29.73 29.73
(1,280) 1:A:31:LEU:CA 1:A:31:LEU:CB 1:A:31:LEU:CG 1:A:31:LEU:CD1 3 (1,425) 1:A:77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:CB 1:A:77:VAL:CG1 5 (1,321) 1:A:43:LEU:C 1:A:44:GLN:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:44:GLN:C 17 (1,207) 1:A:9:CYS:N 1:A:9:CYS:CB 1:A:9:CYS:SG 12 (1,665) 1:A:154:MET:N 1:A:154:MET:CA 1:A:154:MET:C 1:A:155:LEU:N 18 (1,327) 1:A:44:GLN:C 1:A:45:LEU:N 1:A:45:LEU:CA 1:A:45:LEU:C 11 (1,263) 1:A:27:ALA:C 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:C 6 (1,601) 1:A:137:ASP:C 1:A:138:ASN:N 1:A:138:ASN:CA 1:A:138:ASN:C 20 (1,643) 1:A:147:LEU:CA 1:A:147:LEU:CB 1:A:147:LEU:CG 1:A:147:LEU:CD1 16 (1,571) 1:A:132:TYR:N 1:A:84:SER:N 1:A:84:SER:CA 1:A:84:SER:C 13	29.75 29.74 29.74 29.74 29.73 29.73 29.73
(1,425) 1:A:77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:CB 1:A:77:VAL:CG1 5 (1,321) 1:A:43:LEU:C 1:A:44:GLN:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:44:GLN:C 17 (1,207) 1:A:9:CYS:N 1:A:9:CYS:CA 1:A:9:CYS:CB 1:A:9:CYS:SG 12 (1,665) 1:A:154:MET:N 1:A:154:MET:CA 1:A:154:MET:C 1:A:155:LEU:N 18 (1,327) 1:A:44:GLN:C 1:A:45:LEU:N 1:A:45:LEU:CA 1:A:45:LEU:C 11 (1,263) 1:A:27:ALA:C 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:C 6 (1,601) 1:A:137:ASP:C 1:A:138:ASN:N 1:A:138:ASN:CA 1:A:138:ASN:C 20 (1,643) 1:A:147:LEU:CA 1:A:147:LEU:CB 1:A:147:LEU:CG 1:A:147:LEU:CD1 16 (1,571) 1:A:132:TYR:N 1:A:84:SER:N 1:A:84:SER:CA 1:A:84:SER:C 13	29.74 29.74 29.74 29.73 29.73 29.73
(1,321) 1:A:43:LEU:C 1:A:44:GLN:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:44:GLN:C 17 (1,207) 1:A:9:CYS:N 1:A:9:CYS:CA 1:A:9:CYS:CB 1:A:9:CYS:SG 12 (1,665) 1:A:154:MET:N 1:A:154:MET:CA 1:A:154:MET:C 1:A:155:LEU:N 18 (1,327) 1:A:44:GLN:C 1:A:45:LEU:N 1:A:45:LEU:CA 1:A:45:LEU:C 11 (1,263) 1:A:27:ALA:C 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:C 6 (1,601) 1:A:137:ASP:C 1:A:138:ASN:N 1:A:138:ASN:CA 1:A:138:ASN:C 20 (1,643) 1:A:147:LEU:CA 1:A:147:LEU:CB 1:A:147:LEU:CG 1:A:147:LEU:CD1 16 (1,571) 1:A:132:TYR:N 1:A:132:TYR:CA 1:A:132:TYR:CB 1:A:132:TYR:CG 4 (1,448) 1:A:83:GLY:C 1:A:84:SER:N 1:A:84:SER:CA 1:A:84:SER:C 13	29.74 29.74 29.73 29.73 29.73
(1,207) 1:A:9:CYS:N 1:A:9:CYS:CA 1:A:9:CYS:CB 1:A:9:CYS:SG 12 (1,665) 1:A:154:MET:N 1:A:154:MET:CA 1:A:154:MET:C 1:A:155:LEU:N 18 (1,327) 1:A:44:GLN:C 1:A:45:LEU:N 1:A:45:LEU:CA 1:A:45:LEU:C 11 (1,263) 1:A:27:ALA:C 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:C 6 (1,601) 1:A:137:ASP:C 1:A:138:ASN:N 1:A:138:ASN:CA 1:A:138:ASN:C 20 (1,643) 1:A:147:LEU:CA 1:A:147:LEU:CB 1:A:147:LEU:CG 1:A:147:LEU:CD1 16 (1,571) 1:A:132:TYR:N 1:A:132:TYR:CA 1:A:132:TYR:CB 1:A:132:TYR:CG 4 (1,448) 1:A:83:GLY:C 1:A:84:SER:N 1:A:84:SER:CA 1:A:84:SER:C 13	29.74 29.73 29.73 29.73
(1,665) 1:A:154:MET:N 1:A:154:MET:CA 1:A:154:MET:C 1:A:155:LEU:N 18 (1,327) 1:A:44:GLN:C 1:A:45:LEU:N 1:A:45:LEU:CA 1:A:45:LEU:C 11 (1,263) 1:A:27:ALA:C 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:C 6 (1,601) 1:A:137:ASP:C 1:A:138:ASN:N 1:A:138:ASN:CA 1:A:138:ASN:C 20 (1,643) 1:A:147:LEU:CA 1:A:147:LEU:CB 1:A:147:LEU:CG 1:A:147:LEU:CD1 16 (1,571) 1:A:132:TYR:N 1:A:132:TYR:CA 1:A:132:TYR:CB 1:A:132:TYR:CG 4 (1,448) 1:A:83:GLY:C 1:A:84:SER:N 1:A:84:SER:CA 1:A:84:SER:C 13	29.73 29.73 29.73
(1,327) 1:A:44:GLN:C 1:A:45:LEU:N 1:A:45:LEU:CA 1:A:45:LEU:C 11 (1,263) 1:A:27:ALA:C 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:C 6 (1,601) 1:A:137:ASP:C 1:A:138:ASN:N 1:A:138:ASN:CA 1:A:138:ASN:C 20 (1,643) 1:A:147:LEU:CA 1:A:147:LEU:CB 1:A:147:LEU:CG 1:A:147:LEU:CD1 16 (1,571) 1:A:132:TYR:N 1:A:132:TYR:CA 1:A:132:TYR:CB 1:A:132:TYR:CG 4 (1,448) 1:A:83:GLY:C 1:A:84:SER:N 1:A:84:SER:CA 1:A:84:SER:C 13	29.73 29.73
(1,263) 1:A:27:ALA:C 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:C 6 (1,601) 1:A:137:ASP:C 1:A:138:ASN:N 1:A:138:ASN:CA 1:A:138:ASN:C 20 (1,643) 1:A:147:LEU:CA 1:A:147:LEU:CB 1:A:147:LEU:CG 1:A:147:LEU:CD1 16 (1,571) 1:A:132:TYR:N 1:A:132:TYR:CA 1:A:132:TYR:CB 1:A:132:TYR:CG 4 (1,448) 1:A:83:GLY:C 1:A:84:SER:N 1:A:84:SER:CA 1:A:84:SER:C 13	29.73
(1,263) 1:A:27:ALA:C 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:C 6 (1,601) 1:A:137:ASP:C 1:A:138:ASN:N 1:A:138:ASN:CA 1:A:138:ASN:C 20 (1,643) 1:A:147:LEU:CA 1:A:147:LEU:CB 1:A:147:LEU:CG 1:A:147:LEU:CD1 16 (1,571) 1:A:132:TYR:N 1:A:132:TYR:CA 1:A:132:TYR:CB 1:A:132:TYR:CG 4 (1,448) 1:A:83:GLY:C 1:A:84:SER:N 1:A:84:SER:CA 1:A:84:SER:C 13	
(1,601) 1:A:137:ASP:C 1:A:138:ASN:N 1:A:138:ASN:CA 1:A:138:ASN:C 20 (1,643) 1:A:147:LEU:CA 1:A:147:LEU:CB 1:A:147:LEU:CG 1:A:147:LEU:CD1 16 (1,571) 1:A:132:TYR:N 1:A:132:TYR:CA 1:A:132:TYR:CB 1:A:132:TYR:CG 4 (1,448) 1:A:83:GLY:C 1:A:84:SER:N 1:A:84:SER:CA 1:A:84:SER:C 13	
(1,643) 1:A:147:LEU:CA 1:A:147:LEU:CB 1:A:147:LEU:CG 1:A:147:LEU:CD1 16 (1,571) 1:A:132:TYR:N 1:A:132:TYR:CA 1:A:132:TYR:CB 1:A:132:TYR:CG 4 (1,448) 1:A:83:GLY:C 1:A:84:SER:N 1:A:84:SER:CA 1:A:84:SER:C 13	20.12
(1,571) 1:A:132:TYR:N 1:A:132:TYR:CA 1:A:132:TYR:CB 1:A:132:TYR:CG 4 (1,448) 1:A:83:GLY:C 1:A:84:SER:N 1:A:84:SER:CA 1:A:84:SER:C 13	29.71
(1,448) 1:A:83:GLY:C 1:A:84:SER:N 1:A:84:SER:CA 1:A:84:SER:C 13	29.71
	29.71
(1,429) 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:CB 1:A:78:GLU:CG 14	29.71
(1,207) 1:A:9:CYS:N 1:A:9:CYS:CA 1:A:9:CYS:CB 1:A:9:CYS:SG 11	29.71
(1,442) 1:A:82:GLU:N 1:A:82:GLU:CA 1:A:82:GLU:CB 1:A:82:GLU:CG 20	29.7
(1,491) 1:A:102:TYR:N 1:A:102:TYR:CA 1:A:102:TYR:CB 1:A:102:TYR:CG 14	29.69
(1,183) 1:A:4:GLU:N 1:A:4:GLU:CA 1:A:4:GLU:CB 1:A:4:GLU:CG 6	29.69
(1,622) 1:A:142:THR:C 1:A:143:ALA:N 1:A:143:ALA:CA 1:A:143:ALA:C 2	29.68
(1,194) 1:A:6:GLN:N 1:A:6:GLN:CA 1:A:6:GLN:CB 1:A:6:GLN:CG 8	29.67
(1,374) 1:A:61:TYR:N 1:A:61:TYR:CA 1:A:61:TYR:CB 1:A:61:TYR:CG 15	29.66
(1,334) 1:A:45:LEU:C 1:A:46:LEU:N 1:A:46:LEU:CA 1:A:46:LEU:C 1	29.66
(1,259) 1:A:25:GLN:N 1:A:25:GLN:CA 1:A:25:GLN:CB 1:A:25:GLN:CG 16	29.65
(1,502) 1:A:104:GLY:N 1:A:104:GLY:CA 1:A:104:GLY:C 1:A:105:PRO:N 12	29.64
(1,601) 1:A:137:ASP:C 1:A:138:ASN:N 1:A:138:ASN:CA 1:A:138:ASN:C 5	29.62
(1,419) 1:A:75:PHE:N 1:A:75:PHE:CA 1:A:75:PHE:CB 1:A:75:PHE:CG 15	29.62
(1,19) 1:A:20:LEU:C 1:A:21:LEU:N 1:A:21:LEU:CA 1:A:21:LEU:C 10	29.62
(1,176) 1:A:3:PHE:N 1:A:3:PHE:CA 1:A:3:PHE:CB 1:A:3:PHE:CG 17	29.62
(1,516) 1:A:109:ILE:N 1:A:109:ILE:CA 1:A:109:ILE:CB 1:A:109:ILE:CG1 17	29.61
(1,318) 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 1:A:43:LEU:CD1 7	29.6
(1,217) 1:A:11:LEU:N 1:A:11:LEU:CA 1:A:11:LEU:CB 1:A:11:LEU:CG 14	29.6
(1,319) 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 1:A:43:LEU:CD1 9	29.58
(1,679) 1:A:156:HIS:C 1:A:157:GLU:N 1:A:157:GLU:CA 1:A:157:GLU:C 9	29.56
(1,582) 1:A:134:ILE:CA 1:A:134:ILE:CB 1:A:134:ILE:CG1 1:A:134:ILE:CD1 6	29.56
(1,537) 1:A:117:MET:N 1:A:117:MET:CA 1:A:117:MET:CB 1:A:117:MET:CG 14	29.55
(1,352) 1:A:51:LYS:N 1:A:51:LYS:CA 1:A:51:LYS:CB 1:A:51:LYS:CG 19	29.55
(1,284) 1:A:34:LEU:N 1:A:34:LEU:CA 1:A:34:LEU:CB 1:A:34:LEU:CG 10	29.55
(1,243) 1:A:20:LEU:CA 1:A:20:LEU:CB 1:A:20:LEU:CG 1:A:20:LEU:CD1 13	29.55
(1,407) 1:A:71:VAL:N 1:A:71:VAL:CA 1:A:71:VAL:CB 1:A:71:VAL:CG1 9	29.54
(1,654) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 6	29.53
(1,536) 1:A:117:MET:N 1:A:117:MET:CA 1:A:117:MET:CB 1:A:117:MET:CG 6	29.53
(1,211) 1:A:10:GLU:N 1:A:10:GLU:CA 1:A:10:GLU:CB 1:A:10:GLU:CG 2	29.53



	ed from previous pag			.	36 11	T71 1 11
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,473)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	6	29.51
(1,425)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:CB	1:A:77:VAL:CG1	11	29.51
(1,327)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	7	29.51
(1,597)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	16	29.5
(1,292)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	13	29.5
(1,250)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	20	29.49
(1,207)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	6	29.48
(1,627)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	18	29.46
(1,555)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	18	29.46
(1,269)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	17	29.46
(1,210)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	5	29.45
(1,463)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	4	29.44
(1,207)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	17	29.44
(1,677)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	18	29.43
(1,556)	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	1:A:125:PHE:CD1	2	29.43
(1,494)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	8	29.43
(1,410)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	7	29.43
(1,367)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	2	29.43
(1,266)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	3	29.43
(1,180)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	19	29.43
(1,568)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	17	29.42
(1,425)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:CB	1:A:77:VAL:CG1	12	29.42
(1,194)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	9	29.42
(1,488)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	19	29.41
(1,666)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	3	29.4
(1,510)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	1	29.4
(1,418)	1:A:73:PHE:C	1:A:74:GLY:N	1:A:74:GLY:CA	1:A:74:GLY:C	7	29.39
(1,486)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	6	29.36
(1,600)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	2	29.35
(1,521)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	17	29.35
(1,350)	1:A:49:GLN:C	1:A:50:GLY:N	1:A:50:GLY:CA	1:A:50:GLY:C	3	29.35
(1,672)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1	29.34
(1,614)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	1	29.33
(1,474)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	17	29.33
(1,222)	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	1:A:12:LYS:CD	20	29.32
(1,188)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	11	29.32
(1,319)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	14	29.3
(1,671)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	17	29.29
(1,641)	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	12	29.28
(1,419)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	12	29.22
(1,324)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	20	29.22
(1,659)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	10	29.21
(1,336)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	10	29.19
(1,280)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	5	29.19
(1,595)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	14	29.16
(1,642)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	19	29.14
(1,457)	1:A:86:ARG:C	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:C	18	29.14
(1,569)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	18	29.13
(1,479)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	15	29.12
(1,280)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	16	29.12
(1,318)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	5	29.1
(-,0-0)			1.11.10.22.00	1.11.13.111.0.011		ad an mant mass



Key	$egin{array}{c} ed \ from \ previous \ pag \ \hline oldsymbol{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,279)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	12	29.1
(1,620)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	8	29.07
(1,489)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	15	29.07
(1,175)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	3	29.07
(1,590)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	3	29.06
(1,429)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	6	29.06
(1,215)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	7	29.06
(1,176)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	18	29.06
(1,463)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	14	29.04
(1,434)	1:A:79:GLY:C	1:A:80:GLY:N	1:A:80:GLY:CA	1:A:80:GLY:C	16	29.04
(1,257)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	2	29.04
(1,269)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	2	29.03
(1,671)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	6	29.02
(1,663)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	19	29.02
(1,638)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	15	29.02
(1,390)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	7	29.02
(1,188)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	7	29.01
(1,166) $(1,664)$	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	1:A:154:MET:SD	15	29.01
(1,379)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	4	28.99
(1,646)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	1	28.98
(1,563)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	15	28.98
(1,303) $(1,172)$	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	18	28.97
(1,621)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	14	28.96
(1,021) $(1,32)$	1:A:27:ALA:N	1:A:27:ALA:CA	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	17	28.96
(1,32) $(1,580)$	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:27:ALA:C 1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	16	28.95
· · /	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	4	28.95
(1,454)					12	
(1,239)	1:A:18:PRO:N	1:A:18:PRO:CA	1:A:18:PRO:C	1:A:19:ALA:N		28.95
(1,597) (1,258)	1:A:136:LEU:C 1:A:25:GLN:N	1:A:137:ASP:N 1:A:25:GLN:CA	1:A:137:ASP:CA 1:A:25:GLN:CB	1:A:137:ASP:C 1:A:25:GLN:CG	20 18	28.94 28.94
(1,258) $(1,677)$	1:A:25:GLN:N 1:A:156:HIS:N	1:A:25:GLN:CA 1:A:156:HIS:CA	1:A:25:GLN:CB 1:A:156:HIS:CB	1:A:25:GLN:CG 1:A:156:HIS:CG	8	28.92
(, ,	1:A:138:ASN:N			1:A:138:ASN:CG	5	28.92
(1,603)		1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:CB	1:A:138:A5N:CG 1:A:15:ALA:N		
(1,12)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:C		11	28.92
(1,477)	1:A:93:PRO:N 1:A:45:LEU:CA	1:A:93:PRO:CA 1:A:45:LEU:CB	1:A:93:PRO:C	1:A:94:SER:N	4	28.91
(1,331)			1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	5	28.91
(1,253)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	16	28.91
(1,566)	1:A:128:SER:C	1:A:129:GLY:N	1:A:129:GLY:CA	1:A:129:GLY:C	14	28.9
(1,398)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	5	28.89
(1,242)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	18	28.88
(1,280)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	15	28.87
(1,664)	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	1:A:154:MET:SD	11	28.86
(1,258)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	12	28.86
(1,627)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	2	28.85
(1,403)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	11	28.85
(1,327)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	5	28.85
(1,671)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	7	28.84
(1,223)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	11	28.84
(1,549)	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:CB	1:A:121:ASP:CG	4	28.83
(1,253)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	5	28.83
(1,477)	1:A:93:PRO:N	1:A:93:PRO:CA	1:A:93:PRO:C	1:A:94:SER:N	12	28.81
(1,276)	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	1:A:30:GLU:CD	5	28.81
(1,193)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	12	28.81



	ed from previous pag Atom-1		A 4 9	A + 4	N/L - 1 - 1	17: -1-4: (-)
Key		Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,614)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	9	28.8
(1,512)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	15	28.8
(1,306)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	8	28.8
(1,211)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	1	28.79
(1,72)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1	28.76
(1,576)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	15	28.76
(1,275)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	12	28.76
(1,253)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	14	28.76
(1,180)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	17	28.76
(1,504)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	20	28.75
(1,229)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	7	28.73
(1,228)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	13	28.73
(1,186)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	6	28.73
(1,677)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	13	28.71
(1,674)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	8	28.71
(1,622)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	4	28.71
(1,407)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:CB	1:A:71:VAL:CG1	17	28.71
(1,191)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	11	28.71
(1,253)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	2	28.7
(1,266)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	8	28.69
(1,191)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	15	28.69
(1,654)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	12	28.68
(1,643)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	9	28.68
(1,218)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	6	28.68
(1,207)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	9	28.68
(1,192)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	10	28.67
(1,188)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	12	28.67
(1,170)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	13	28.67
(1,68)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:GLU:N	9	28.66
(1,654)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	18	28.66
(1,193)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	1	28.65
(1,643)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	18	28.64
(1,536)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	18	28.64
(1,489)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	16	28.64
(1,410)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	5	28.64
(1,404)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	12	28.6
(1,215)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	2	28.6
(1,535)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	6	28.59
(1,30)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:ALA:N	18	28.59
(1,169)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	20	28.59
(1,410)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	3	28.58
(1,392)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	16	28.58
(1,243)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	11	28.58
(1,339)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	1	28.57
(1,518)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	17	28.56
(1,206)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	2	28.56
(1,576)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	3	28.54
(1,339)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	10	28.54
(1,200)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	10	28.54
(1,32)	1:A:27:ALA:N	1:A:27:ALA:CA	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	7	28.52
(1,608)	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	1:A:140:ALA:CA	1:A:140:ALA:C	7	28.51
(1,000)	1.11.100.11 100.0		1.11.11.10.1111.011	1.11.11.0.1111.0		20.01



	ed from previous pag				36 11	T71 1 11
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,84)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	17	28.5
(1,575)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	13	28.5
(1,494)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	10	28.5
(1,658)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	12	28.48
(1,649)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	14	28.47
(1,572)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	10	28.46
(1,521)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	9	28.46
(1,471)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	11	28.46
(1,336)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	13	28.46
(1,286)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	20	28.46
(1,339)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	9	28.45
(1,188)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	10	28.45
(1,662)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	5	28.44
(1,321)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	16	28.44
(1,646)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	8	28.43
(1,483)	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	1:A:96:LYS:CD	16	28.43
(1,310)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	9	28.42
(1,243)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	9	28.42
(1,212)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	3	28.42
(1,207)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	3	28.42
(1,582)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	10	28.41
(1,399)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	10	28.41
(1,619)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	6	28.38
(1,477)	1:A:93:PRO:N	1:A:93:PRO:CA	1:A:93:PRO:C	1:A:94:SER:N	11	28.38
(1,429)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	17	28.38
(1,286)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	17	28.38
(1,537)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	11	28.36
(1,483)	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	1:A:96:LYS:CD	19	28.35
(1,319)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	2	28.34
(1,658)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	15	28.33
(1,682)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	6	28.32
(1,392)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	4	28.27
(1,272)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	11	28.26
(1,239)	1:A:18:PRO:N	1:A:18:PRO:CA	1:A:18:PRO:C	1:A:19:ALA:N	13	28.24
(1,32)	1:A:27:ALA:N	1:A:27:ALA:CA	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	11	28.23
(1,261)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	15	28.23
(1,220)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	7	28.23
(1,543)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	4	28.22
(1,318)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	16	28.22
(1,228)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	4	28.21
(1,167)	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	1:A:1:MET:SD	12	28.21
(1,619)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	15	28.19
(1,463)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	16	28.19
(1,429)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	8	28.19
(1,423) $(1,621)$	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	18	28.17
(1,621) $(1,628)$	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	20	28.16
(1,643)	1:A:144:I 1tO.C 1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	10	28.13
(1,398)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	16	28.13
(1,398) $(1,296)$	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	15	28.12
(1,290) $(1,84)$	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	6	28.12
(1,654)	1:A:91:LEU:N 1:A:151:VAL:N	1:A:91:LEU:CA 1:A:151:VAL:CA	1:A:91:LEU:C 1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	8	28.1
(1,004)	1.A.101; VAL:IV	1.A.101. VAL.UA	1.A.101. VAL:OD	1.A.131. VAL.OGI		20.1



(1,537) 1:A:24*TIREN		d from previous pag					
(1,435)	Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,475) 1:A-77-VALEN	(1,256)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	15	28.1
(1,176 1-A-3-PHEN	(1,537)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	15	28.08
(1.645)	(1,425)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:CB	1:A:77:VAL:CG1	9	28.08
(1,473) 1:A-92-THRN 1:A-92-THR-CA 1:A-92-THR-CB 1:A-91-VAL-CG 1 (1,654) 1:A-151-VAL-N 1:A-151-VAL-CA 1:A-151-VAL-CB 1:A-151-VAL-CG 1 (1,451) 1:A-85-GLY-C 1:A-86-ARG-CA 1:A-86-ARG-CA 1:A-86-ARG-C 9 (1,395) 1:A-66-AL-A-C 1:A-67-GLY-N 1:A-67-GLY-CA 1:A-67-GLY-CA 1:A-67-GLY-CA 1:A-67-GLY-CA 1:A-67-GLY-CA 1:A-67-GLY-CA 1:A-67-GLY-CA 1:A-67-GLY-CA 1:A-167-GLY-CA 1:A-167-GL	(1,176)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	13	28.07
(1.654)	(1,645)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	4	28.06
(1,451)	(1,473)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	13	28.06
(1,395	(1,654)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	1	28.05
(1.474)	(1,451)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	9	28.05
(1.619) 1:A:142:THR:N 1:A:142:THR:CA 1:A:142:THR:CB 1:A:142:THR:OG1 5 (1.65) 1:A:1:MET:N 1:A:1:MET:CA 1:A:1:MET:CB 1:A:1:MET:CG 12 (1.425) 1:A:7:VAL:N 1:A:7:VAL:CA 1:A:7:VAL:CG 1:A:1:MET:CG 1:A:1:MET:CG 1:A:1:MET:CG 1:A:1:MET:CB 1:A:7:VAL:CG 1:A:16 (1.368) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:CB 1:A:58:PHE:CG 13 (1.537) 1:A:11:MET:N 1:A:117:MET:CA 1:A:117:MET:CB 1:A:117:MET:CG 2 (1.451) 1:A:85:GLY:C 1:A:86:ARG:N 1:A:86:ARG:CA 1:A:86:ARG:C 14 (1.654) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CG 9 (1.407) 1:A:71:VAL:N 1:A:71:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG 9 (1.407) 1:A:71:VAL:N 1:A:71:VAL:CA 1:A:71:VAL:CB 1:A:71:VAL:CG 20 (1.465) 1:A:89:THR:N 1:A:36:GLU:CA 1:A:36:GLU:CB 1:A:36:GLU:CG 6 (1.239) 1:A:43:LEU:CA 1:A:13:TYR:CB 1:A:36:GLU:CG 6 (1.239) 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CB 1:A:13:TYR:CG 6 (1.526) 1:A:13:TYR:N 1:A:13:TYR:CA 1:A:13:TYR:CB 1:A:13:TYR:CG 6 (1.465) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:43:LEU:CG 1:A:43:LEU:CD 15 (1.526) 1:A:13:TYR:N 1:A:13:TYR:CA 1:A:13:TYR:CB 1:A:36:THR:OG 9 (1.460) 1:A:36:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:58:PHE:CB 1:A:58:PHE:CG 19 (1.460) 1:A:43:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CD 6 (1.229) 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CD 6 (1.666) 1:A:14:MET:N 1:A:13:MET:CA 1:A:13:MET:CB 1:A:13:THR:CG 13 (1.389:THR:N 1:A:64:MET:CA 1:A:13:MET:CB 1:A:13:THR:CG 13 (1.389:THR:N 1:A:64:MET:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CD 1:A:	(1,395)	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	15	28.05
(1,165)	(1,474)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	12	28.04
(1,425	(1,619)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	5	28.03
(1,368) 1:A:58:PHE:N	(1,165)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	12	28.03
1.537	(1,425)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:CB	1:A:77:VAL:CG1	16	28.01
(1,537)	(1,368)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	13	28.01
(1,451) 1:A:85:GLY:C 1:A:86:ARG:N 1:A:86:ARG:C 14 (1,654) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CG 9 (1,407) 1:A:71:VAL:N 1:A:71:VAL:CB 1:A:71:VAL:CG 9 (1,407) 1:A:36:TLN:N 1:A:36:TLN:CB 1:A:71:VAL:CG 9 (1,407) 1:A:36:SLN:N 1:A:38:PRO:CB 1:A:71:VAL:CB 1:A:71:VAL:CG 9 (1,407) 1:A:38:PRIR:N 1:A:38:PRIR:CA 1:A:38:PTHR:CB 1:A:38:PTHR:CG 1 (1,294) 1:A:36:GLU:N 1:A:36:GLU:CA 1:A:36:GLU:CB 1:A:36:GLU:CG 6 (1,294) 1:A:36:GLU:CA 1:A:36:GLU:CB 1:A:36:GLU:CG 6 (1,319) 1:A:34:LEU:CA 1:A:38:LEU:CB 1:A:38:LEU:CD 1:A:13:TYR:CG 6 (1,526) 1:A:13:TYR:N 1:A:13:TYR:CA 1:A:38:THR:CB 1:A:38:THR:CG 6 (1,465) 1:A:38:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:38:PHE:CG 19 (1,460) 1:A:34:LEU:CA 1:A:78:VAL:CB 1:A:38:PHE:CG 19 <td>· /</td> <td>1:A:117:MET:N</td> <td>1:A:117:MET:CA</td> <td>1:A:117:MET:CB</td> <td>1:A:117:MET:CG</td> <td>2</td> <td>27.98</td>	· /	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	2	27.98
(1,654)	` '	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	14	27.98
(1,407) 1:A:71:VAL:N 1:A:71:VAL:CA 1:A:71:VAL:CB 1:A:71:VAL:CG1 20 (1,465) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 11 (1,294) 1:A:36:GLU:N 1:A:36:GLU:CA 1:A:36:GLU:CB 1:A:43:CU:CB 1:A:43:CU:CB 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 1:A:43:LEU:CD1 15 (1,319) 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 1:A:43:LEU:CD1 15 (1,526) 1:A:113:TYR:N 1:A:13:TYR:CA 1:A:43:LEU:CG 1:A:48:LEU:CD1 15 (1,465) 1:A:489:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:489:THR:OG1 9 (1,367) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:CB 1:A:489:THR:CG1 19 (1,460) 1:A:48:TWL:N 1:A:48:TWL:CA 1:A:48:TWL:CB 1:A:48:TWL:CG1 8 (1,229) 1:A:41:LEU:CA 1:A:1:MET:CA 1:A:48:THR:CB 1:A:41:LEU:CD1 6 (1,465) 1:A:48:THR:N 1:A:1:A:48:THR:CA 1:A:48:THR:CB 1:A:43:LEU:CD1 13 <	· · /						27.95
(1,465)	· /		1:A:71:VAL:CA				27.95
(1,294)	· /			1:A:89:THR:CB		11	27.94
(1,239)	· /		1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB			27.94
(1,319) 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 1:A:43:LEU:CD1 15 (1,526) 1:A:113:TYR:N 1:A:113:TYR:CA 1:A:113:TYR:CB 1:A:113:TYR:CG 6 (1,465) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 9 (1,367) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:CB 1:A:89:THR:CG 19 (1,460) 1:A:78:VAL:N 1:A:87:VAL:CA 1:A:87:VAL:CB 1:A:7VAL:CG 8 (1,229) 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CDI 6 (1,166) 1:A:1:MET:N 1:A:1:MET:CA 1:A:1:MET:CB 1:A:1:MET:CG 5 (1,465) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:46:MET:C 1:A:65:SER:N 1 (1,388) 1:A:64:MET:N 1:A:64:MET:CA 1:A:46:MET:C 1:A:65:SER:N 1 (1,258) 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CD1 13 (1,258) 1:A:25:GLN:N 1:A:25:GLN:CA 1:A:25:GLN:CB 1:A:45:SCSCB 19 (1,1	· /			1:A:18:PRO:C	1:A:19:ALA:N		27.93
(1,526) 1:A:113:TYR:N 1:A:113:TYR:CA 1:A:113:TYR:CB 1:A:113:TYR:CG 6 (1,465) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 9 (1,367) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:CB 1:A:58:PHE:CG 19 (1,367) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:CB 1:A:58:PHE:CG 19 (1,460) 1:A:37:VAL:N 1:A:48:VAL:CA 1:A:48:VAL:CB 1:A:48:VAL:CG 18 (1,229) 1:A:41:LEU:CA 1:A:41:MET:CA 1:A:41:MET:CB 1:A:41:MET:CG 5 (1,465) 1:A:38:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 13 (1,388) 1:A:64:MET:N 1:A:64:MET:CA 1:A:64:MET:C 1:A:65:SER:N 1 (1,318) 1:A:23:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 1:A:43:LEU:CD1 13 (1,207) 1:A:9:CYS:N 1:A:25:GLN:CA 1:A:25:GLN:CB 1:A:43:CSCGLN:CG 4 (1,207) 1:A:9:CYS:N 1:A:49:CYS:CA 1:A:49:CYS:CB 1:A:49:CYS:CB 1:	` /	1:A:43:LEU:CA					27.92
(1,465) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 9 (1,367) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:CB 1:A:58:PHE:CG 19 (1,460) 1:A:87:VAL:N 1:A:87:VAL:CA 1:A:87:VAL:CB 1:A:87:VAL:CG1 8 (1,229) 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 1:A:14:MET:CB 5 (1,166) 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:MET:CA 1:A:14:MET:CB 1:A:14:MET:CG 5 (1,465) 1:A:89:THR:N 1:A:64:MET:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 13 (1,388) 1:A:64:MET:N 1:A:64:MET:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 13 (1,318) 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 1:A:43:LEU:CD1 13 (1,258) 1:A:25:GLN:N 1:A:25:GLN:CA 1:A:25:GLN:CB 1:A:43:LEU:CD1 13 (1,207) 1:A:9:CYS:N 1:A:9:CYS:CA 1:A:9:CYS:CB 1:A:9:CYS:SG 19 (1,19) 1:A:20:LEU:C 1:A:13:13:LEU:C 1:A:13:13:LEU:CD 1	· /	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG		27.91
(1,367) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:CB 1:A:58:PHE:CG 19 (1,460) 1:A:87:VAL:N 1:A:87:VAL:CA 1:A:87:VAL:CB 1:A:87:VAL:CG1 8 (1,229) 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 1:A:14:LEU:CD1 6 (1,466) 1:A:1:MET:N 1:A:1:MET:CA 1:A:1:MET:CB 1:A:1:MET:CG 5 (1,465) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:48:PTR:CG1 13 (1,388) 1:A:64:MET:N 1:A:64:MET:CA 1:A:64:MET:C 1:A:65:SER:N 1 (1,318) 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CD1 13 (1,207) 1:A:9:CYS:N 1:A:9:CYS:CA 1:A:9:CYS:CB 1:A:9:CYS:SG 19 (1,19) 1:A:20:LEU:C 1:A:21:LEU:C 1:A:153:LEU:C 1:A:153:LEU:C 12 (1,603) 1:A:138:ASN:N 1:A:138:ASN:CA 1:A:138:ASN:CB 1:A:138:ASN:CG 13 (1,290) 1:A:14:PRO:C 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:C 19 (1	· /						27.9
(1,460) 1:A:87:VAL:N 1:A:87:VAL:CA 1:A:87:VAL:CB 1:A:87:VAL:CG1 8 (1,229) 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 1:A:14:LEU:CD1 6 (1,166) 1:A:1:MET:N 1:A:1:MET:CA 1:A:1:MET:CB 1:A:1:MET:CG 5 (1,465) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 13 (1,388) 1:A:64:MET:N 1:A:64:MET:CA 1:A:64:MET:C 1:A:65:SER:N 1 (1,318) 1:A:64:MET:N 1:A:64:MET:CA 1:A:43:LEU:CG 1:A:43:LEU:CD1 13 (1,318) 1:A:64:MET:N 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 1:A:43:LEU:CD1 13 (1,208) 1:A:25:GLN:N 1:A:25:GLN:CB 1:A:43:LEU:CG 1:A:43:LEU:CD1 13 (1,207) 1:A:9:CYS:N 1:A:29:CYS:CA 1:A:29:CYS:CB 1:A:9:CYS:SG 19 (1,19) 1:A:20:LEU:C 1:A:153:LEU:CB 1:A:153:LEU:CA 1:A:153:LEU:CB 1:A:153:LEU:CB 1:A:153:LEU:CB 1:A:153:LEU:CB 1:A:153:LEU:CB 1:A:145:ASP:CB 19	· /					19	27.9
(1,229) 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:CB 1:A:14:LEU:CG 1:A:14:LEU:CD1 6 (1,166) 1:A:1:MET:N 1:A:1:MET:CA 1:A:1:MET:CB 1:A:1:MET:CG 5 (1,465) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:489:THR:OG1 13 (1,388) 1:A:64:MET:N 1:A:64:MET:CA 1:A:64:MET:C 1:A:65:SER:N 1 (1,318) 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 1:A:43:LEU:CD1 13 (1,258) 1:A:25:GLN:N 1:A:25:GLN:CA 1:A:25:GLN:CB 1:A:25:GLN:CG 4 (1,207) 1:A:9:CYS:N 1:A:9:CYS:CA 1:A:9:CYS:CB 1:A:9:CYS:SG 19 (1,19) 1:A:20:LEU:C 1:A:21:LEU:N 1:A:21:LEU:CA 1:A:153:LEU:CD 12 (1,658) 1:A:153:LEU:CA 1:A:153:LEU:CB 1:A:153:LEU:CG 1:A:138:ASN:CG 13 (1,603) 1:A:138:ASN:N 1:A:138:ASN:CA 1:A:138:ASN:CB 1:A:145:ASP:C 19 (1,190) 1:A:5:CYS:N 1:A:45:CYS:CA 1:A:145:ASP:C 19 <th< td=""><td>` /</td><td>1:A:87:VAL:N</td><td>1:A:87:VAL:CA</td><td>1:A:87:VAL:CB</td><td>1:A:87:VAL:CG1</td><td></td><td>27.88</td></th<>	` /	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1		27.88
(1,166) 1:A:1:MET:N 1:A:1:MET:CA 1:A:1:MET:CB 1:A:1:MET:CG 5 (1,465) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 13 (1,388) 1:A:64:MET:N 1:A:64:MET:CA 1:A:64:MET:C 1:A:65:SER:N 1 (1,318) 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 1:A:43:LEU:CD1 13 (1,258) 1:A:25:GLN:N 1:A:25:GLN:CA 1:A:25:GLN:CB 1:A:25:GLN:CG 4 (1,207) 1:A:9:CYS:N 1:A:9:CYS:CA 1:A:9:CYS:CB 1:A:9:CYS:SG 19 (1,19) 1:A:20:LEU:C 1:A:21:LEU:N 1:A:21:LEU:CA 1:A:135:LEU:CD 12 (1,658) 1:A:138:ASN:A 1:A:138:ASN:CA 1:A:138:ASN:CB 1:A:138:ASN:CB 1:A:138:ASN:CG 13 (1,603) 1:A:138:ASN:N 1:A:138:ASN:CA 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:C 19 (1,190) 1:A:5:CYS:N 1:A:136:LEU:C 1:A:156:CLY:N 20 (1,590) 1:A:135:TYR:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:C 1:A:136:LEU:C 19	· /	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1		27.88
(1,388) 1:A:64:MET:N 1:A:64:MET:CA 1:A:64:MET:C 1:A:65:SER:N 1 (1,318) 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 1:A:43:LEU:CD1 13 (1,258) 1:A:25:GLN:N 1:A:25:GLN:CA 1:A:25:GLN:CB 1:A:25:GLN:CG 4 (1,207) 1:A:9:CYS:N 1:A:9:CYS:CA 1:A:9:CYS:CB 1:A:9:CYS:SG 19 (1,19) 1:A:20:LEU:C 1:A:21:LEU:N 1:A:21:LEU:CA 1:A:21:LEU:C 12 (1,658) 1:A:153:LEU:CA 1:A:153:LEU:CB 1:A:153:LEU:CG 1:A:138:ASN:CG 13 (1,603) 1:A:138:ASN:N 1:A:138:ASN:CA 1:A:138:ASN:CB 1:A:138:ASN:CG 13 (1,628) 1:A:144:PRO:C 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:C 19 (1,190) 1:A:5:CYS:N 1:A:5:CYS:CA 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 19 (1,282) 1:A:31:LEU:C 1:A:32:GLY:N 1:A:32:GLY:CA 1:A:32:GLY:C 10 (1,450) 1:A:84:SER:C 1:A:85:GLY:N 1:A:85:GLY:CA 1:A:109:ILE:CD1 15 <td>` /</td> <td>1:A:1:MET:N</td> <td>1:A:1:MET:CA</td> <td>1:A:1:MET:CB</td> <td>1:A:1:MET:CG</td> <td>5</td> <td>27.88</td>	` /	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	5	27.88
(1,318) 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 1:A:43:LEU:CD1 13 (1,258) 1:A:25:GLN:N 1:A:25:GLN:CA 1:A:25:GLN:CB 1:A:25:GLN:CG 4 (1,207) 1:A:9:CYS:N 1:A:9:CYS:CA 1:A:9:CYS:CB 1:A:9:CYS:SG 19 (1,19) 1:A:20:LEU:C 1:A:21:LEU:N 1:A:21:LEU:CA 1:A:21:LEU:C 12 (1,658) 1:A:153:LEU:CA 1:A:153:LEU:CB 1:A:153:LEU:CG 1:A:153:LEU:CD1 7 (1,603) 1:A:138:ASN:N 1:A:138:ASN:CA 1:A:138:ASN:CB 1:A:138:ASN:CG 13 (1,628) 1:A:144:PRO:C 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:C 19 (1,190) 1:A:5:CYS:N 1:A:5:CYS:CA 1:A:16:GLN:N 20 (1,590) 1:A:135:TYR:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 19 (1,282) 1:A:31:LEU:C 1:A:32:GLY:N 1:A:32:GLY:CA 1:A:32:GLY:C 10 (1,450) 1:A:84:SER:C 1:A:85:GLY:N 1:A:85:GLY:C 6 (1,519) 1:A:	(1,465)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	13	27.87
(1,318) 1:A:43:LEU:CA 1:A:43:LEU:CB 1:A:43:LEU:CG 1:A:43:LEU:CD1 13 (1,258) 1:A:25:GLN:N 1:A:25:GLN:CA 1:A:25:GLN:CB 1:A:25:GLN:CG 4 (1,207) 1:A:9:CYS:N 1:A:9:CYS:CA 1:A:9:CYS:CB 1:A:9:CYS:SG 19 (1,19) 1:A:20:LEU:C 1:A:21:LEU:N 1:A:21:LEU:CA 1:A:21:LEU:C 12 (1,658) 1:A:153:LEU:CA 1:A:153:LEU:CB 1:A:153:LEU:CG 1:A:153:LEU:CD1 7 (1,603) 1:A:138:ASN:N 1:A:138:ASN:CA 1:A:138:ASN:CB 1:A:138:ASN:CG 13 (1,628) 1:A:144:PRO:C 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:C 19 (1,190) 1:A:5:CYS:N 1:A:5:CYS:CA 1:A:16:GLN:N 20 (1,590) 1:A:135:TYR:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 19 (1,282) 1:A:31:LEU:C 1:A:32:GLY:N 1:A:32:GLY:CA 1:A:32:GLY:C 10 (1,450) 1:A:84:SER:C 1:A:85:GLY:N 1:A:85:GLY:C 6 (1,519) 1:A:	(1,388)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1	27.87
(1,258) 1:A:25:GLN:N 1:A:25:GLN:CA 1:A:25:GLN:CB 1:A:25:GLN:CG 4 (1,207) 1:A:9:CYS:N 1:A:9:CYS:CA 1:A:9:CYS:CB 1:A:9:CYS:SG 19 (1,19) 1:A:20:LEU:C 1:A:21:LEU:N 1:A:21:LEU:CA 1:A:21:LEU:C 12 (1,658) 1:A:153:LEU:CA 1:A:153:LEU:CB 1:A:153:LEU:CG 1:A:153:LEU:CD1 7 (1,603) 1:A:138:ASN:N 1:A:138:ASN:CA 1:A:138:ASN:CB 1:A:138:ASN:CG 13 (1,628) 1:A:144:PRO:C 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:C 19 (1,190) 1:A:5:CYS:N 1:A:5:CYS:CA 1:A:5:CYS:C 1:A:6:GLN:N 20 (1,590) 1:A:135:TYR:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 19 (1,282) 1:A:31:LEU:C 1:A:32:GLY:N 1:A:32:GLY:CA 1:A:32:GLY:C 10 (1,450) 1:A:84:SER:C 1:A:85:GLY:N 1:A:109:ILE:CB 1:A:109:ILE:CG1 1:A:109:ILE:CD1 15 (1,32) 1:A:17:ALA:N 1:A:27:ALA:CA 1:A:27:ALA:C 1:A:18	(1,318)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	13	27.87
(1,19) 1:A:20:LEU:C 1:A:21:LEU:N 1:A:21:LEU:CA 1:A:21:LEU:C 12 (1,658) 1:A:153:LEU:CA 1:A:153:LEU:CB 1:A:153:LEU:CG 1:A:153:LEU:CD1 7 (1,603) 1:A:138:ASN:N 1:A:138:ASN:CA 1:A:138:ASN:CB 1:A:138:ASN:CG 13 (1,628) 1:A:144:PRO:C 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:C 19 (1,190) 1:A:5:CYS:N 1:A:5:CYS:CA 1:A:5:CYS:C 1:A:6:GLN:N 20 (1,590) 1:A:135:TYR:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 19 (1,282) 1:A:31:LEU:C 1:A:32:GLY:N 1:A:32:GLY:CA 1:A:32:GLY:C 10 (1,450) 1:A:84:SER:C 1:A:85:GLY:N 1:A:85:GLY:CA 1:A:85:GLY:C 6 (1,519) 1:A:109:ILE:CA 1:A:109:ILE:CB 1:A:109:ILE:CG1 1:A:109:ILE:CD1 15 (1,621) 1:A:27:ALA:N 1:A:27:ALA:CA 1:A:27:ALA:C 1:A:28:MET:N 5 (1,632) 1:A:119:TRP:N 1:A:119:TRP:CA 1:A:119:TRP:CB 1:A:119:TRP:CG <t< td=""><td>(1,258)</td><td>1:A:25:GLN:N</td><td>1:A:25:GLN:CA</td><td>1:A:25:GLN:CB</td><td>1:A:25:GLN:CG</td><td>4</td><td>27.87</td></t<>	(1,258)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	4	27.87
(1,19) 1:A:20:LEU:C 1:A:21:LEU:N 1:A:21:LEU:CA 1:A:21:LEU:C 12 (1,658) 1:A:153:LEU:CA 1:A:153:LEU:CB 1:A:153:LEU:CG 1:A:153:LEU:CD1 7 (1,603) 1:A:138:ASN:N 1:A:138:ASN:CA 1:A:138:ASN:CB 1:A:138:ASN:CG 13 (1,628) 1:A:144:PRO:C 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:C 19 (1,190) 1:A:5:CYS:N 1:A:5:CYS:CA 1:A:5:CYS:C 1:A:6:GLN:N 20 (1,590) 1:A:135:TYR:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 19 (1,282) 1:A:31:LEU:C 1:A:32:GLY:N 1:A:32:GLY:CA 1:A:32:GLY:C 10 (1,450) 1:A:84:SER:C 1:A:85:GLY:N 1:A:85:GLY:CA 1:A:85:GLY:C 6 (1,519) 1:A:109:ILE:CA 1:A:109:ILE:CB 1:A:109:ILE:CG1 1:A:109:ILE:CD1 15 (1,621) 1:A:27:ALA:N 1:A:27:ALA:CA 1:A:27:ALA:C 1:A:28:MET:N 5 (1,632) 1:A:119:TRP:N 1:A:119:TRP:CA 1:A:119:TRP:CB 1:A:119:TRP:CG <t< td=""><td>· /</td><td></td><td>1:A:9:CYS:CA</td><td>1:A:9:CYS:CB</td><td>1:A:9:CYS:SG</td><td>19</td><td>27.87</td></t<>	· /		1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	19	27.87
(1,603) 1:A:138:ASN:N 1:A:138:ASN:CA 1:A:138:ASN:CB 1:A:138:ASN:CG 13 (1,628) 1:A:144:PRO:C 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:C 19 (1,190) 1:A:5:CYS:N 1:A:5:CYS:CA 1:A:5:CYS:C 1:A:6:GLN:N 20 (1,590) 1:A:135:TYR:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 19 (1,282) 1:A:31:LEU:C 1:A:32:GLY:N 1:A:32:GLY:CA 1:A:32:GLY:C 10 (1,450) 1:A:84:SER:C 1:A:85:GLY:N 1:A:85:GLY:CA 1:A:85:GLY:C 6 (1,519) 1:A:109:ILE:CA 1:A:109:ILE:CB 1:A:109:ILE:CG1 1:A:109:ILE:CD1 15 (1,32) 1:A:27:ALA:N 1:A:27:ALA:CA 1:A:27:ALA:C 1:A:28:MET:N 5 (1,681) 1:A:157:GLU:N 1:A:157:GLU:CA 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:GLU:CG 13 (1,543) 1:A:142:THR:C 1:A:143:ALA:N 1:A:143:ALA:CA 1:A:143:ALA:C 1 (1,491) 1:A:102:TYR:N 1:A:102:TYR:CA 1:A:102:TYR:CB 1:A:102:TYR:CG	(1,19)	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	12	27.87
(1,628) 1:A:144:PRO:C 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:C 19 (1,190) 1:A:5:CYS:N 1:A:5:CYS:CA 1:A:5:CYS:C 1:A:6:GLN:N 20 (1,590) 1:A:135:TYR:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 19 (1,282) 1:A:31:LEU:C 1:A:32:GLY:N 1:A:32:GLY:CA 1:A:32:GLY:C 10 (1,450) 1:A:84:SER:C 1:A:85:GLY:N 1:A:85:GLY:CA 1:A:85:GLY:C 6 (1,519) 1:A:109:ILE:CA 1:A:109:ILE:CB 1:A:109:ILE:CG1 1:A:109:ILE:CD1 15 (1,32) 1:A:27:ALA:N 1:A:27:ALA:CA 1:A:27:ALA:C 1:A:28:MET:N 5 (1,681) 1:A:157:GLU:N 1:A:157:GLU:CA 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:GLU:CG 13 (1,543) 1:A:119:TRP:N 1:A:119:TRP:CA 1:A:119:TRP:CB 1:A:119:TRP:CG 5 (1,622) 1:A:142:THR:C 1:A:143:ALA:N 1:A:143:ALA:CA 1:A:102:TYR:CB 1:A:102:TYR:CG 17	(1,658)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	7	27.85
(1,190) 1:A:5:CYS:N 1:A:5:CYS:CA 1:A:5:CYS:C 1:A:6:GLN:N 20 (1,590) 1:A:135:TYR:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 19 (1,282) 1:A:31:LEU:C 1:A:32:GLY:N 1:A:32:GLY:CA 1:A:32:GLY:C 10 (1,450) 1:A:84:SER:C 1:A:85:GLY:N 1:A:85:GLY:CA 1:A:85:GLY:C 6 (1,519) 1:A:109:ILE:CA 1:A:109:ILE:CB 1:A:109:ILE:CG1 1:A:109:ILE:CD1 15 (1,32) 1:A:27:ALA:N 1:A:27:ALA:CA 1:A:27:ALA:C 1:A:28:MET:N 5 (1,681) 1:A:157:GLU:N 1:A:157:GLU:CA 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:GLU:CG 13 (1,543) 1:A:119:TRP:N 1:A:119:TRP:CA 1:A:119:TRP:CB 1:A:119:TRP:CG 5 (1,622) 1:A:142:THR:C 1:A:143:ALA:N 1:A:143:ALA:CA 1:A:102:TYR:CB 1:A:102:TYR:CG 17	(1,603)	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:CB	1:A:138:ASN:CG	13	27.85
(1,590) 1:A:135:TYR:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 19 (1,282) 1:A:31:LEU:C 1:A:32:GLY:N 1:A:32:GLY:CA 1:A:32:GLY:C 10 (1,450) 1:A:84:SER:C 1:A:85:GLY:N 1:A:85:GLY:CA 1:A:85:GLY:C 6 (1,519) 1:A:109:ILE:CA 1:A:109:ILE:CB 1:A:109:ILE:CG1 1:A:109:ILE:CD1 15 (1,32) 1:A:27:ALA:N 1:A:27:ALA:CA 1:A:27:ALA:C 1:A:28:MET:N 5 (1,681) 1:A:157:GLU:N 1:A:157:GLU:CA 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:GLU:CG 13 (1,543) 1:A:119:TRP:N 1:A:119:TRP:CA 1:A:119:TRP:CB 1:A:119:TRP:CG 5 (1,622) 1:A:142:THR:C 1:A:143:ALA:N 1:A:143:ALA:CA 1:A:143:ALA:C 1 (1,491) 1:A:102:TYR:N 1:A:102:TYR:CA 1:A:102:TYR:CB 1:A:102:TYR:CG 17	(1,628)	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	19	27.84
(1,282) 1:A:31:LEU:C 1:A:32:GLY:N 1:A:32:GLY:CA 1:A:32:GLY:C 10 (1,450) 1:A:84:SER:C 1:A:85:GLY:N 1:A:85:GLY:CA 1:A:85:GLY:C 6 (1,519) 1:A:109:ILE:CA 1:A:109:ILE:CB 1:A:109:ILE:CG1 1:A:109:ILE:CD1 15 (1,32) 1:A:27:ALA:N 1:A:27:ALA:CA 1:A:27:ALA:C 1:A:28:MET:N 5 (1,681) 1:A:157:GLU:N 1:A:157:GLU:CA 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:GLU:CG 13 (1,543) 1:A:119:TRP:N 1:A:119:TRP:CA 1:A:119:TRP:CB 1:A:119:TRP:CG 5 (1,622) 1:A:142:THR:C 1:A:143:ALA:N 1:A:143:ALA:CA 1:A:143:ALA:C 1 (1,491) 1:A:102:TYR:N 1:A:102:TYR:CA 1:A:102:TYR:CB 1:A:102:TYR:CG 17	(1,190)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	20	27.84
(1,450) 1:A:84:SER:C 1:A:85:GLY:N 1:A:85:GLY:CA 1:A:85:GLY:C 6 (1,519) 1:A:109:ILE:CA 1:A:109:ILE:CB 1:A:109:ILE:CG1 1:A:109:ILE:CD1 15 (1,32) 1:A:27:ALA:N 1:A:27:ALA:CA 1:A:27:ALA:C 1:A:28:MET:N 5 (1,681) 1:A:157:GLU:N 1:A:157:GLU:CA 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:GLU:CG 13 (1,543) 1:A:119:TRP:N 1:A:119:TRP:CA 1:A:119:TRP:CB 1:A:119:TRP:CG 5 (1,622) 1:A:142:THR:C 1:A:143:ALA:N 1:A:143:ALA:CA 1:A:143:ALA:C 1 (1,491) 1:A:102:TYR:N 1:A:102:TYR:CA 1:A:102:TYR:CB 1:A:102:TYR:CG 17	(1,590)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	19	27.83
(1,519) 1:A:109:ILE:CA 1:A:109:ILE:CB 1:A:109:ILE:CG1 1:A:109:ILE:CD1 15 (1,32) 1:A:27:ALA:N 1:A:27:ALA:CA 1:A:27:ALA:C 1:A:28:MET:N 5 (1,681) 1:A:157:GLU:N 1:A:157:GLU:CA 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:GLU:CG 13 (1,543) 1:A:119:TRP:N 1:A:119:TRP:CA 1:A:119:TRP:CB 1:A:119:TRP:CG 5 (1,622) 1:A:142:THR:C 1:A:143:ALA:N 1:A:143:ALA:CA 1:A:143:ALA:C 1 (1,491) 1:A:102:TYR:N 1:A:102:TYR:CA 1:A:102:TYR:CB 1:A:102:TYR:CG 17	(1,282)	1:A:31:LEU:C	1:A:32:GLY:N	1:A:32:GLY:CA	1:A:32:GLY:C	10	27.83
(1,32) 1:A:27:ALA:N 1:A:27:ALA:CA 1:A:27:ALA:C 1:A:28:MET:N 5 (1,681) 1:A:157:GLU:N 1:A:157:GLU:CA 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:GLU:CG 13 (1,543) 1:A:119:TRP:N 1:A:119:TRP:CA 1:A:119:TRP:CB 1:A:119:TRP:CG 5 (1,622) 1:A:142:THR:C 1:A:143:ALA:N 1:A:143:ALA:CA 1:A:143:ALA:C 1 (1,491) 1:A:102:TYR:N 1:A:102:TYR:CA 1:A:102:TYR:CB 1:A:102:TYR:CG 17	(1,450)	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	1:A:85:GLY:CA	1:A:85:GLY:C	6	27.82
(1,681) 1:A:157:GLU:N 1:A:157:GLU:CA 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:GLU:CG 13 (1,543) 1:A:119:TRP:N 1:A:119:TRP:CA 1:A:119:TRP:CB 1:A:119:TRP:CG 5 (1,622) 1:A:142:THR:C 1:A:143:ALA:N 1:A:143:ALA:CA 1:A:143:ALA:C 1 (1,491) 1:A:102:TYR:N 1:A:102:TYR:CA 1:A:102:TYR:CB 1:A:102:TYR:CG 17	(1,519)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	15	27.81
(1,681) 1:A:157:GLU:N 1:A:157:GLU:CA 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:GLU:CG 13 (1,543) 1:A:119:TRP:N 1:A:119:TRP:CA 1:A:119:TRP:CB 1:A:119:TRP:CG 5 (1,622) 1:A:142:THR:C 1:A:143:ALA:N 1:A:143:ALA:CA 1:A:143:ALA:C 1 (1,491) 1:A:102:TYR:N 1:A:102:TYR:CA 1:A:102:TYR:CB 1:A:102:TYR:CG 17	· /	1:A:27:ALA:N	1:A:27:ALA:CA	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	5	27.81
(1,622) 1:A:142:THR:C 1:A:143:ALA:N 1:A:143:ALA:CA 1:A:143:ALA:C 1 (1,491) 1:A:102:TYR:N 1:A:102:TYR:CA 1:A:102:TYR:CB 1:A:102:TYR:CG 17	(1,681)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	13	27.8
(1,491) 1:A:102:TYR:N 1:A:102:TYR:CA 1:A:102:TYR:CB 1:A:102:TYR:CG 17	(1,543)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	5	27.8
	(1,622)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	1	27.79
(1.463) 1.4.90.THP.N 1.4.90.THP.CA 1.4.90.THD.CB 1.4.90.THD.OC1 15	(1,491)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	17	27.79
(1,400)	(1,463)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	15	27.78
(1,442) 1:A:82:GLU:N 1:A:82:GLU:CB 1:A:82:GLU:CG 1	(1,442)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	1	27.78
(1,250) 1:A:22:ILE:N 1:A:22:ILE:CA 1:A:22:ILE:CB 1:A:22:ILE:CG1 8	(1,250)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	8	27.78
(1,342) 1:A:47:ALA:C 1:A:48:GLY:N 1:A:48:GLY:CA 1:A:48:GLY:C 20	(1,342)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:GLY:N	1:A:48:GLY:CA	1:A:48:GLY:C	20	27.77



I-MIETEN	(1,166) 1:A:1:MET:N (1,537) 1:A:117:MET: (1,541) 1:A:118:LYS:C (1,318) 1:A:43:LEU:C (1,194) 1:A:6:GLN:N (1,363) 1:A:55:GLY:N (1,206) 1:A:8:VAL:N (1,206) 1:A:11:LEU:C (1,506) 1:A:106:TYR: (1,506) 1:A:108:GLU: (1,539) 1:A:118:LYS:I (1,513) 1:A:108:GLU: (1,527) 1:A:113:TYR: (1,527) 1:A:108:GLU: (1,379) 1:A:62:PHE:I (1,542) 1:A:109:ILE:I (1,542) 1:A:149:THR: (1,556) 1:A:113:TYR: (1,516) 1:A:149:THR: (1,527) 1:A:39:TYR:I (1,516) 1:A:156:HIS:I (1,527) 1:A:13:TYR:I (1,527) 1:A:13:TYR:I (1,527) 1:A:13:TYR:I (1,527) 1:A:13:TYR:I (1,527) 1:A:13:TYR:I (1,527) 1:A:13:TYR:I (1,523) <td< th=""><th></th><th>d from previous pag</th><th>A</th><th></th><th>3.5.1.1</th><th>T70 1 ()</th></td<>		d from previous pag	A		3.5.1.1	T70 1 ()
17.MET.N	(1,537) 1:A:117:MET: (1,541) 1:A:118:LYS:C (1,318) 1:A:43:LEU:C (1,194) 1:A:6:GLN:N (1,363) 1:A:55:GLY:N (1,218) 1:A:11:LEU:C (1,206) 1:A:8:VAL:N (1,344) 1:A:48:GLY:C (1,506) 1:A:106:TYR: (1,539) 1:A:118:LYS:N (1,513) 1:A:108:GLU:C (1,250) 1:A:22:ILE:N (1,527) 1:A:113:TYR:C (1,512) 1:A:108:GLU:C (1,379) 1:A:62:PHE:N (1,526) 1:A:13:TYR:C (1,516) 1:A:109:ILE:N (1,526) 1:A:13:TYR:C (1,516) 1:A:109:ILE:N (1,527) 1:A:13:TYR:C (1,516) 1:A:109:ILE:N (1,527) 1:A:13:TYR:C (1,516) 1:A:109:ILE:N (1,527) 1:A:156:HIS:N (1,250) 1:A:22:ILE:N (1,527) 1:A:113:TYR:C (1,611) 1:A:140:ALA:C (1,453) 1:A:61:TYR:N (1,250) 1:A:21:ILE:N (1,527) 1:A:113:TYR:C (1,374) 1:A:61:TYR:N (1,374) 1:A:61:TYR:N (1,374) 1:A:61:TYR:N (1,379) 1:A:62:PHE:N (1,120) 1:A:14:LEU:C (1,379) 1:A:42:ILE:N (1,121) 1:A:14:LEU:C (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,246) 1:A:21:LEU:C (1,379) 1:A:156:HIS:C (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,246) 1:A:138:ASN:C (1,311) 1:A:45:LEU:C (1,309) 1:A:41:IEU:C (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,448) 1:A:33:GLY:C (1,448) 1:A:33:GLY:C (1,448) 1:A:46:LEU:C (1,379) 1:A:62:PHE:N (1,379) 1:A:61:TYR:N	Atom-2	Atom-1	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
	(1,541) 1:A:118:LYS:C (1,318) 1:A:43:LEU:C (1,194) 1:A:6:GLN:N (1,363) 1:A:55:GLY:N (1,218) 1:A:11:LEU:C (1,206) 1:A:8:VAL:N (1,344) 1:A:48:GLY:C (1,506) 1:A:106:TYR: (1,539) 1:A:118:LYS:N (1,513) 1:A:108:GLU:C (1,527) 1:A:13:TYR:C (1,527) 1:A:13:TYR:C (1,512) 1:A:108:GLU:C (1,379) 1:A:62:PHE:N (1,542) 1:A:13:TYR:C (1,544) 1:A:149:THR:C (1,545) 1:A:13:TYR:C (1,516) 1:A:109:ILE:N (1,526) 1:A:13:TYR:C (1,516) 1:A:140:ALA:C (1,453) 1:A:63:RYR:N (1,516) 1:A:156:HIS:N (1,527) 1:A:113:TYR:C (1,527) 1:A:113:TYR:C (1,527) 1:A:113:TYR:C (1,527) 1:A:113:TYR:C (1,527) 1:A:12:LE:N (1,527) 1:A:12:LE:N (1,527) 1:A:113:TYR:C (1,374) 1:A:61:TYR:N (1,374) 1:A:61:TYR:N (1,374) 1:A:61:TYR:N (1,379) 1:A:42:ILE:N (1,120) 1:A:14:LEU:C (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,121) 1:A:14:LEU:C (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,246) 1:A:13:TYR:C (1,331) 1:A:45:LEU:C						
33.LEU.CA	(1,318) 1:A:43:LEU:C (1,194) 1:A:6:GLN:N (1,363) 1:A:55:GLY:N (1,218) 1:A:11:LEU:C (1,206) 1:A:8:VAL:N (1,344) 1:A:48:GLY:C (1,506) 1:A:106:TYR: (1,539) 1:A:118:LYS:N (1,513) 1:A:108:GLU:C (1,527) 1:A:113:TYR:C (1,512) 1:A:108:GLU:C (1,379) 1:A:62:PHE:N (1,526) 1:A:13:TYR:C (1,516) 1:A:149:THR:C (1,527) 1:A:13:TYR:C (1,549) 1:A:149:THR:C (1,540) 1:A:149:THR:C (1,527) 1:A:13:TYR:C (1,541) 1:A:140:ALA:C (1,542) 1:A:140:ALA:C (1,543) 1:A:61:FYR:N (1,544) 1:A:140:ALA:C (1,453) 1:A:156:HIS:N (1,527) 1:A:113:TYR:C (1,527) 1:A:113:TYR:C (1,527) 1:A:113:TYR:C (1,527) 1:A:113:TYR:C (1,527) 1:A:113:TYR:C (1,528) 1:A:112:VAL:C (1,529) 1:A:113:TYR:C (1,520) 1:A:113:TYR:C (1,521) 1:A:113:TYR:C (1,522) 1:A:113:TYR:C (1,523) 1:A:112:VAL:C (1,524) 1:A:112:VAL:C (1,524) 1:A:20:LEU:C (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,120) 1:A:14:LEU:C (1,301) 1:A:14:CEU:C (1,302) 1:A:13:A:14:CU:C (1,537) 1:A:117:MET:C (1,548) 1:A:13:ILE:C (1,549) 1:A:13:ILE:C (1,540) 1:A:14:ILE:C (1,541) 1:A:14:ILE:C (1,542) 1:A:14:ILE:C (1,543) 1:A:14:ILE:C (1,544) 1:A:27:ALA:C (1,545) 1:A:17:VAL:N (1,545) 1:A:17:VAL:N (1,546) 1:A:17:LEU:C (1,379) 1:A:62:PHE:N (1,379) 1:A:61:TYR:N (1,379) 1:A:61:TYR:N (1,379) 1:A:61:TYR:N (1,379) 1:A:61:TYR:N						
1-1-1-2-1-2-1-2-2-2-2-2-2-2-2-2-2-2-2-2	(1,194) 1:A:6:GLN:N (1,363) 1:A:55:GLY:N (1,218) 1:A:11:LEU:C (1,206) 1:A:8:VAL:N (1,344) 1:A:48:GLY:C (1,506) 1:A:106:TYR: (1,539) 1:A:118:LYS:N (1,513) 1:A:108:GLU:N (1,527) 1:A:113:TYR:N (1,512) 1:A:108:GLU:N (1,379) 1:A:62:PHE:N (1,526) 1:A:13:TYR:N (1,516) 1:A:149:THR:N (1,527) 1:A:13:TYR:N (1,517) 1:A:13:TYR:N (1,518) 1:A:149:THR:N (1,526) 1:A:13:TYR:N (1,516) 1:A:149:THR:N (1,527) 1:A:39:TYR:N (1,517) 1:A:156:HIS:N (1,527) 1:A:13:TYR:N (1,527) 1:A:13:TYR:N (1,527) 1:A:13:TYR:N (1,527) 1:A:13:TYR:N (1,527) 1:A:13:TYR:N (1,527) 1:A:13:TYR:N (1,527) 1:A:113:TYR:N (1,527) 1:A:113:TYR:N (1,527) 1:A:113:TYR:N (1,527) 1:A:113:TYR:N (1,527) 1:A:113:TYR:N (1,528) 1:A:112:VAL:N (1,529) 1:A:112:VAL:N (1,520) 1:A:42:ILEU:N (1,521) 1:A:14:LEU:N (1,522) 1:A:14:LEU:N (1,523) 1:A:14:LEU:N (1,524) 1:A:44:GLN:N (1,524) 1:A:44:GLN:N (1,525) 1:A:134:ILE:N (1,526) 1:A:134:ILE:N (1,527:ALA:C (1,537) 1:A:134:ILE:C (1,537) 1:A:17:NET:N (1,528) 1:A:134:ILE:C (1,537) 1:A:17:VAL:N (1,537) 1:A:17:VAL:N (1,537) 1:A:17:VAL:N (1,537) 1:A:17:VAL:N (1,537) 1:A:17:VAL:N (1,537) 1:A:17:VAL:N (1,537) 1:A:134:ILE:C (1,537) 1:A:14:T-ILEU:C (1,537) 1:A:14:T-ILEU:C (1,537) 1:A:14:T-ILEU:C (1,537) 1:A:14:T-ILEU:C (1,537) 1:A:17:VAL:N					I	
1.1. 1.1.	(1,363) 1:A:55:GLY:1 (1,218) 1:A:11:LEU:C (1,206) 1:A:8:VAL:N (1,344) 1:A:48:GLY:C (1,506) 1:A:106:TYR: (1,539) 1:A:118:LYS:1 (1,513) 1:A:108:GLU: (1,527) 1:A:113:TYR: (1,512) 1:A:108:GLU: (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,242) 1:A:20:LEU:C (1,649) 1:A:149:THR: (1,526) 1:A:113:TYR: (1,516) 1:A:109:ILE:1 (1,297) 1:A:39:TYR:1 (1,611) 1:A:140:ALA: (1,453) 1:A:66:ARG:1 (1,677) 1:A:156:HIS:1 (1,250) 1:A:22:ILE:N (1,527) 1:A:113:TYR: (1,528) 1:A:113:TYR: (1,374) 1:A:61:TYR:1 (1,374) 1:A:61:TYR:1 (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,12) 1:A:14:LEU:C (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,331) 1:A:145:HIS:C (1,331) 1:A:145:LEU:C (1,156) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,337) 1:A:117:MET: (1,309) 1:A:40:HIS:C (1,309) 1:A:40:HIS:C (1,337) 1:A:17:LEU:C (1,309) 1:A:40:HIS:C (1,309) 1:A:40:HIS:C						
	(1,218) 1:A:11:LEU:C (1,206) 1:A:8:VAL:N (1,344) 1:A:48:GLY:C (1,506) 1:A:106:TYR: (1,539) 1:A:118:LYS:I (1,513) 1:A:108:GLU: (1,250) 1:A:13:TYR: (1,527) 1:A:113:TYR: (1,512) 1:A:108:GLU:C (1,379) 1:A:62:PHE:N (1,242) 1:A:20:LEU:C (1,649) 1:A:113:TYR: (1,516) 1:A:109:ILE:N (1,526) 1:A:113:TYR: (1,516) 1:A:109:ILE:N (1,527) 1:A:39:TYR:N (1,516) 1:A:13:TYR:C (1,516) 1:A:13:TYR:C (1,516) 1:A:13:TYR:C (1,297) 1:A:39:TYR:N (1,611) 1:A:140:ALA:C (1,453) 1:A:68:ARG:N (1,677) 1:A:156:HIS:N (1,250) 1:A:22:ILE:N (1,527) 1:A:113:TYR:C (1,374) 1:A:61:TYR:N (1,374) 1:A:61:TYR:N (1,374) 1:A:62:PHE:N (1,379) 1:A:62:PHE:N (1,120) 1:A:14:LEU:C (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,156) 1:A:138:ASN:C (1,310) 1:A:138:ASN:C (1,311) 1:A:45:LEU:C (1,331) 1:A:44:GLN:N (1,603) 1:A:138:ASN:C (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,331) 1:A:46:LEU:C (1,337) 1:A:127:LEU:C (1,337) 1:A:127:LEU:C (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:N						
18.	(1,206) 1:A:8:VAL:N (1,344) 1:A:48:GLY:0 (1,506) 1:A:106:TYR: (1,539) 1:A:118:LYS:1 (1,513) 1:A:108:GLU: (1,250) 1:A:22:ILE:N (1,527) 1:A:113:TYR: (1,512) 1:A:108:GLU: (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,242) 1:A:20:LEU:C (1,649) 1:A:149:THR: (1,526) 1:A:113:TYR: (1,516) 1:A:109:ILE:1 (1,297) 1:A:39:TYR:1 (1,611) 1:A:140:ALA: (1,453) 1:A:66:HIS:1 (1,250) 1:A:22:ILE:N (1,527) 1:A:113:TYR: (1,527) 1:A:113:TYR: (1,374) 1:A:61:TYR:1 (1,374) 1:A:61:TYR:1 (1,379) 1:A:42:ILE:N (1,379) 1:A:42:ILE:N (1,120) 1:A:42:ILE:N (1,121) 1:A:14:LEU:C (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,122) 1:A:113:THR: (1,1309) 1:A:42:ILE:N (1,146) 1:A:149:THR: (1,156) 1:A:149:THR: (1,156) 1:A:149:THR: (1,156) 1:A:149:THR: (1,156) 1:A:149:THR: (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,310) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,1560) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,379) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:27:ALA:C (1,302) 1:A:138:ILE:C (1,448) 1:A:27:ALA:C (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,379) 1:A:61:TYR:1						
48:GLY:C	(1,344) 1:A:48:GLY:(1,506) 1:A:106:TYR: (1,539) 1:A:118:LYS:] (1,513) 1:A:108:GLU: (1,250) 1:A:22:ILE:N (1,527) 1:A:113:TYR: (1,512) 1:A:108:GLU: (1,379) 1:A:62:PHE:] (1,242) 1:A:20:LEU:C (1,649) 1:A:149:THR: (1,526) 1:A:113:TYR: (1,516) 1:A:109:ILE:] (1,297) 1:A:39:TYR:] (1,611) 1:A:140:ALA: (1,453) 1:A:86:ARG:] (1,677) 1:A:156:HIS:] (1,250) 1:A:113:TYR: (1,527) 1:A:113:TYR: (1,374) 1:A:61:TYR:] (1,374) 1:A:61:TYR:] (1,379) 1:A:30:GLU:] (1,379) 1:A:42:ILE:N (1,120) 1:A:42:ILE:N (1,121) 1:A:14:LEU:C (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,309) 1:A:43:ILE:C (1,311) 1:A:145:LEU:C (1,324) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,331) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:27:ALA:C (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:40:HIS:C (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:] (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:] (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:]						
18.1 18.1	(1,506) 1:A:106:TYR: (1,539) 1:A:118:LYS:1 (1,513) 1:A:108:GLU: (1,250) 1:A:22:ILE:N (1,527) 1:A:113:TYR: (1,512) 1:A:108:GLU: (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,242) 1:A:20:LEU:C (1,649) 1:A:149:THR: (1,526) 1:A:113:TYR: (1,516) 1:A:109:ILE:1 (1,297) 1:A:39:TYR:1 (1,611) 1:A:140:ALA: (1,453) 1:A:86:ARG:1 (1,677) 1:A:156:HIS:1 (1,250) 1:A:22:ILE:N (1,527) 1:A:113:TYR: (1,527) 1:A:113:TYR: (1,374) 1:A:61:TYR:1 (1,275) 1:A:30:GLU:1 (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,12) 1:A:14:LEU:C (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,246) 1:A:134:THR: (1,679) 1:A:156:HIS:C (1,324) 1:A:149:THR: (1,603) 1:A:149:THR: (1,603) 1:A:149:THR: (1,603) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:27:ALA:C (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:27:ALA:C (1,309) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,309) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,301) 1:A:134:ILE:C (1,302) 1:A:134:ILE:C (1,337) 1:A:17:LEU:C (1,337) 1:A:17:LEU:C (1,337) 1:A:12:LEU:C						
H8LYS:N	(1,539) 1:A:118:LYS: (1,513) 1:A:108:GLU: (1,250) 1:A:22:ILE:N (1,527) 1:A:113:TYR: (1,512) 1:A:108:GLU: (1,379) 1:A:62:PHE:I (1,242) 1:A:20:LEU:C (1,649) 1:A:149:THR: (1,526) 1:A:113:TYR: (1,516) 1:A:109:ILE:I (1,297) 1:A:39:TYR:I (1,611) 1:A:140:ALA: (1,453) 1:A:86:ARG:I (1,677) 1:A:156:HIS:I (1,250) 1:A:22:ILE:N (1,527) 1:A:113:TYR: (1,374) 1:A:61:TYR:I (1,374) 1:A:61:TYR:I (1,379) 1:A:62:PHE:I (1,12) 1:A:14:LEU:C (1,379) 1:A:42:ILE:N (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,309) 1:A:14:LEU:C (1,156) 1:A:149:THR: (1,679) 1:A:156:HIS:C (1,331) 1:A:44:GLN:I (1,603) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:27:ALA:C (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:46:LEU:C (1,379) 1:A:62:PHE:I (1,309) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:I (1,309) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:I (1,374) 1:A:61:TYR:I						
1.8.108;GLU;N	(1,513) 1:A:108:GLU: (1,250) 1:A:22:ILE:N (1,527) 1:A:113:TYR: (1,512) 1:A:108:GLU: (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,242) 1:A:20:LEU:C (1,649) 1:A:149:THR: (1,526) 1:A:113:TYR: (1,516) 1:A:109:ILE:N (1,297) 1:A:39:TYR:N (1,611) 1:A:140:ALA: (1,453) 1:A:66:ARG:N (1,677) 1:A:156:HIS:N (1,250) 1:A:22:ILE:N (1,527) 1:A:113:TYR: (1,374) 1:A:61:TYR:N (1,374) 1:A:61:TYR:N (1,374) 1:A:61:TYR:N (1,379) 1:A:20:LEU:C (1,379) 1:A:42:ILE:N (1,12) 1:A:14:LEU:N (1,12) 1:A:14:LEU:N (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,309) 1:A:43:ILE:C (1,156) 1:A:149:THR: (1,679) 1:A:156:HIS:C (1,324) 1:A:44:GLN:N (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:27:ALA:C (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:27:ALA:C (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,374) 1:A:61:TYR:N (1,302) 1:A:46:LEU:C (1,337) 1:A:127:LEU:C (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:N		1:A:106:TYR:N				
1-22:ILE:N	(1,250) 1:A:22:ILE:N (1,527) 1:A:113:TYR: (1,512) 1:A:108:GLU: (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,242) 1:A:20:LEU:C (1,649) 1:A:13:TYR: (1,526) 1:A:113:TYR: (1,516) 1:A:109:ILE:1 (1,297) 1:A:39:TYR:1 (1,611) 1:A:140:ALA: (1,453) 1:A:86:ARG:1 (1,677) 1:A:156:HIS:1 (1,250) 1:A:22:ILE:N (1,527) 1:A:113:TYR: (1,374) 1:A:61:TYR:1 (1,275) 1:A:30:GLU:1 (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,12) 1:A:14:LEU:C (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,246) 1:A:21:LEU:C (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,324) 1:A:156:HIS:C (1,340) 1:A:42:ILE:N (1,246) 1:A:113:TYR:1 (1,246) 1:A:113:TYR:1 (1,603) 1:A:14:LEU:C (1,156) 1:A:149:THR:1 (1,603) 1:A:156:HIS:C (1,324) 1:A:156:HIS:C (1,324) 1:A:156:HIS:C (1,324) 1:A:156:HIS:C (1,331) 1:A:156:HIS:C (
13:TYR:N	(1,527) 1:A:113:TYR: (1,512) 1:A:20:LEU:C (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,242) 1:A:149:THR: (1,526) 1:A:13:TYR: (1,516) 1:A:109:ILE:1 (1,297) 1:A:39:TYR:1 (1,611) 1:A:140:ALA: (1,453) 1:A:86:ARG:1 (1,677) 1:A:156:HIS:1 (1,250) 1:A:113:TYR: (1,527) 1:A:113:TYR: (1,527) 1:A:113:TYR: (1,527) 1:A:113:TYR: (1,374) 1:A:61:TYR:1 (1,275) 1:A:30:GLU:1 (1,523) 1:A:112:VAL: (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,12) 1:A:14:LEU:C (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,246) 1:A:21:LEU:C (1,309) 1:A:44:GLN:1 (1,603) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,537) 1:A:117:MET: (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:27:ALA:C (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,309) 1:A:40:HIS:C (1,309) 1:A:40:HIS:C (1,309) 1:A:40:HIS:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,560) 1:A:134:ILE:C (1,537) 1:A:134:ILE:C (1,537) 1:A:134:ILE:C (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,374) 1:A:61:TYR:1 (1:A:108:GLU:N				
08:GLU:N	(1,512) 1:A:108:GLU: (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,242) 1:A:20:LEU:C (1,649) 1:A:149:THR: (1,526) 1:A:113:TYR: (1,516) 1:A:109:ILE:1 (1,297) 1:A:39:TYR:1 (1,611) 1:A:140:ALA: (1,453) 1:A:86:ARG:1 (1,677) 1:A:156:HIS:1 (1,250) 1:A:22:ILE:N (1,527) 1:A:113:TYR: (1,374) 1:A:61:TYR:1 (1,275) 1:A:30:GLU:1 (1,523) 1:A:112:VAL: (1,242) 1:A:20:LEU:C (1,379) 1:A:42:ILE:N (1,12) 1:A:14:LEU:1 (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,246) 1:A:21:LEU:C (1,156) 1:A:138:ASN: (1,324) 1:A:156:HIS:C (1,324) 1:A:149:THR: (1,603) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:27:ALA:C (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:27:ALA:C (1,448) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,374) 1:A:61:TYR:1						
62:PHE:N 1:A:62:PHE:CA 1:A:62:PHE:CB 1:A:62:PHE:CG 17 27.65 00:LEU:CA 1:A:20:LEU:CB 1:A:20:LEU:CD 19 27.65 49:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:CB 1:A:149:THR:CG 1 27.63 13:TYR:N 1:A:113:TYR:CA 1:A:113:TYR:CB 1:A:13:TYR:CG 18 27.63 109:ILE:N 1:A:109:ILE:CA 1:A:109:ILE:CB 1:A:109:ILE:CG1 7 27.63 30:TYR:N 1:A:39:TYR:CA 1:A:39:TYR:CB 1:A:39:TYR:CG 11 27.63 40:ALA:C 1:A:41:IGU:N 1:A:141:GLU:CA 1:A:39:TYR:CG 11 27.63 40:ALA:C 1:A:41:IGU:N 1:A:141:GLU:CA 1:A:30:TYR:CG 14 27.62 156:HIS:N 1:A:256:HIS:CA 1:A:156:HIS:CB 1:A:156:HIS:CG 1 27.61 152:HIE:N 1:A:251:HE:CA 1:A:211:HE:CB 1:A:251:HE:CGI 5 27.61 13:TYR:N 1:A:411:TYR:CA 1:A:113:TYR:CB 1:A:411:TYR:CG 15 27.6 60:TYR:N 1:A:42:TYR:CA	(1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,242) 1:A:20:LEU:C (1,649) 1:A:149:THR: (1,526) 1:A:113:TYR: (1,516) 1:A:109:ILE:1 (1,297) 1:A:39:TYR:1 (1,611) 1:A:140:ALA: (1,453) 1:A:86:ARG:1 (1,677) 1:A:156:HIS:1 (1,250) 1:A:22:ILE:N (1,527) 1:A:113:TYR: (1,374) 1:A:61:TYR:1 (1,275) 1:A:30:GLU:1 (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,12) 1:A:14:LEU:1 (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,340) 1:A:149:THR: (1,679) 1:A:138:ASN: (1,341) 1:A:44:GLN:1 (1,363) 1:A:138:ASN: (1,363) 1:A:138:ASN: (1,364) 1:A:44:GLN:1 (1,379) 1:A:45:LEU:C (1,156) 1:A:117:MET: (1,603) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,562) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:27:ALA:C (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,379) 1:A:61:TYR:1		1:A:113:TYR:N				
1.4.20.LEU.CA	(1,242) 1:A:20:LEU:C (1,649) 1:A:149:THR: (1,526) 1:A:113:TYR: (1,516) 1:A:109:ILE:I (1,297) 1:A:39:TYR:I (1,611) 1:A:140:ALA: (1,453) 1:A:86:ARG:I (1,677) 1:A:156:HIS:I (1,250) 1:A:22:ILE:N (1,527) 1:A:113:TYR: (1,374) 1:A:61:TYR:I (1,275) 1:A:30:GLU:I (1,523) 1:A:112:VAL: (1,242) 1:A:20:LEU:C (1,379) 1:A:62:PHE:I (1,12) 1:A:14:LEU:N (1,12) 1:A:14:LEU:N (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,309) 1:A:149:THR: (1,679) 1:A:156:HIS:C (1,324) 1:A:149:THR: (1,603) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:27:ALA:C (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:83:GLY:C (1,425) 1:A:77:VAL:N (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:I (1,379) 1:A:62:PHE:I (1,379) 1:A:62:PHE:I (1,379) 1:A:62:PHE:I (1,379) 1:A:62:PHE:I (1,374) 1:A:61:TYR:I	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	16	27.65
49:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:CB 1:A:149:THR:OG1 4 27.63 13:TYR:N 1:A:113:TYR:CA 1:A:113:TYR:CB 1:A:109:ILE:CG1 7 27.63 109:ILE:N 1:A:109:ILE:CA 1:A:109:ILE:CB 1:A:109:ILE:CG1 7 27.63 39:TYR:N 1:A:39:TYR:CA 1:A:141:GLU:CA 1:A:39:TYR:CG 11 27.62 34:0:ALA:C 1:A:141:GLU:N 1:A:41:GLU:CA 1:A:36:ARG:CG 3 27.62 156:HIS:N 1:A:156:HIS:CA 1:A:156:HIS:CB 1:A:156:HIS:CG 1 27.61 122:HE:N 1:A:22:ILE:CA 1:A:22:ILE:CB 1:A:22:ILE:CG1 5 27.61 13:TYR:N 1:A:13:TYR:CA 1:A:61:TYR:CB 1:A:61:TYR:CG 8 27.6 30:GLU:N 1:A:30:GLU:CA 1:A:112:VAL:CB 1:A:112:VAL:CG 2 27.57 10:LEU:CA 1:A:20:LEU:CB 1:A:20:LEU:CG 1:A:20:LEU:CB 1 27.56 62:PHE:N 1:A:62:PHE:CA 1:A:62:PHE:CB 1:A:62:PHE:CG 2 27.55 14:LEU:CA	(1,649) 1:A:149:THR: (1,526) 1:A:113:TYR: (1,516) 1:A:109:ILE: (1,297) 1:A:39:TYR: (1,611) 1:A:140:ALA: (1,453) 1:A:86:ARG: (1,677) 1:A:156:HIS: (1,250) 1:A:22:ILE:N (1,527) 1:A:113:TYR: (1,374) 1:A:61:TYR: (1,275) 1:A:30:GLU: (1,275) 1:A:30:GLU: (1,242) 1:A:20:LEU:C (1,379) 1:A:42:ILE:N (1,12) 1:A:14:LEU: (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,246) 1:A:149:THR: (1,679) 1:A:156:HIS:C (1,324) 1:A:149:THR: (1,603) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:33:GLY:C (1,448) 1:A:40:HIS:C (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:C (1,379) 1:A:62:PHE:C (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:C	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CB		17	27.65
13:TYR:N	(1,526) 1:A:113:TYR: (1,516) 1:A:109:ILE:1 (1,297) 1:A:39:TYR:1 (1,611) 1:A:140:ALA: (1,453) 1:A:86:ARG:1 (1,677) 1:A:156:HIS:1 (1,250) 1:A:22:ILE:N (1,527) 1:A:113:TYR: (1,374) 1:A:61:TYR:1 (1,275) 1:A:30:GLU:1 (1,523) 1:A:112:VAL: (1,242) 1:A:20:LEU:C (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,12) 1:A:14:LEU:N (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,246) 1:A:21:LEU:C (1,309) 1:A:44:GLN:1 (1,679) 1:A:156:HIS:C (1,324) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:27:ALA:C (1,448) 1:A:38:GLY:C (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,302) 1:A:46:LEU:C (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:		1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	19	
109:ILE:N	(1,516) 1:A:109:ILE:1 (1,297) 1:A:39:TYR:1 (1,611) 1:A:39:TYR:1 (1,611) 1:A:40:ALA: (1,453) 1:A:86:ARG:1 (1,677) 1:A:156:HIS:1 (1,250) 1:A:22:ILE:N (1,527) 1:A:113:TYR: (1,374) 1:A:61:TYR:1 (1,275) 1:A:30:GLU:1 (1,275) 1:A:20:LEU:C (1,324) 1:A:62:PHE:1 (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,309) 1:A:42:ILEU:C (1,309) 1:A:42:ILEU:C (1,560) 1:A:149:THR: (1,679) 1:A:156:HIS:C (1,324) 1:A:44:GLN:1 (1,603) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,582) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:27:ALA:C (1,448) 1:A:38:GLY:C (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,362) 1:A:127:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:1	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1		
39:TYR:N	(1,297) 1:A:39:TYR:1 (1,611) 1:A:140:ALA: (1,453) 1:A:86:ARG:1 (1,677) 1:A:156:HIS:1 (1,250) 1:A:22:ILE:N (1,527) 1:A:113:TYR:1 (1,374) 1:A:61:TYR:1 (1,275) 1:A:30:GLU:1 (1,523) 1:A:112:VAL: (1,242) 1:A:20:LEU:C (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,12) 1:A:14:LEU:N (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,246) 1:A:21:LEU:C (1,156) 1:A:149:THR: (1,679) 1:A:156:HIS:C (1,324) 1:A:44:GLN:1 (1,603) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:27:ALA:C (1,448) 1:A:33:GLY:C (1,448) 1:A:40:HIS:C (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,374) 1:A:61:TYR:1	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	18	27.63
40:ALA:C	(1,611) 1:A:140:ALA: (1,453) 1:A:86:ARG:I (1,677) 1:A:156:HIS:I (1,250) 1:A:22:ILE:N (1,527) 1:A:113:TYR: (1,374) 1:A:61:TYR:I (1,275) 1:A:30:GLU:I (1,523) 1:A:112:VAL: (1,242) 1:A:20:LEU:C (1,379) 1:A:62:PHE:I (1,12) 1:A:14:LEU:N (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,246) 1:A:21:LEU:C (1,156) 1:A:149:THR: (1,679) 1:A:156:HIS:C (1,324) 1:A:44:GLN:I (1,603) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:27:ALA:C (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:83:GLY:C (1,425) 1:A:77:VAL:N (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:I (1,379) 1:A:62:PHE:I (1,379) 1:A:62:PHE:I (1,374) 1:A:61:TYR:I	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:N		1:A:109:ILE:CG1	7	27.63
1:A:86:ARG:N	(1,453) 1:A:86:ARG:1 (1,677) 1:A:156:HIS:1 (1,250) 1:A:22:ILE:N (1,527) 1:A:113:TYR: (1,374) 1:A:61:TYR:1 (1,275) 1:A:30:GLU:1 (1,523) 1:A:112:VAL: (1,242) 1:A:20:LEU:C (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,12) 1:A:14:LEU:N (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,246) 1:A:21:LEU:C (1,156) 1:A:149:THR: (1,679) 1:A:156:HIS:C (1,331) 1:A:44:GLN:1 (1,603) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:27:ALA:C (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:83:GLY:C (1,425) 1:A:77:VAL:N (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,562) 1:A:127:LEU:C (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:1	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	11	27.63
156:HIS:N 1:A:156:HIS:CA 1:A:156:HIS:CB 1:A:156:HIS:CG 1 27.61 122:ILE:N 1:A:22:ILE:CA 1:A:22:ILE:CB 1:A:22:ILE:CGI 5 27.61 13:TYR:N 1:A:113:TYR:CA 1:A:113:TYR:CB 1:A:4113:TYR:CG 15 27.6 61:TYR:N 1:A:61:TYR:CA 1:A:61:TYR:CB 1:A:61:TYR:CG 8 27.6 61:TYR:N 1:A:30:GLU:CA 1:A:30:GLU:CB 1:A:30:GLU:CG 2 27.57 112:VAL:N 1:A:112:VAL:CA 1:A:112:VAL:CB 1:A:30:GLU:CG 1 27.56 10:LEU:CA 1:A:12:UAL:CB 1:A:20:LEU:CDI 10 27.56 22.55 14:LEU:N 1:A:62:PHE:CA 1:A:62:PHE:CB 1:A:62:PHE:CG 20 27.55 14:LEU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:C 1:A:15:ALA:N 12 27.55 14:LEU:CA 1:A:14:PHR:C 1:A:21:LEU:CB 1:A:21:LEU:CDI 14 27.52 11:LEU:CA 1:A:13:TRICC 1:A:13:TRICC 6 27.49 14:GHIS:C 1:A:14:CBU:CB 1:A:15:G	(1,677) 1:A:156:HIS:1 (1,250) 1:A:22:ILE:N (1,527) 1:A:113:TYR: (1,374) 1:A:61:TYR:1 (1,275) 1:A:30:GLU:1 (1,523) 1:A:112:VAL: (1,242) 1:A:20:LEU:C (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,12) 1:A:14:LEU:N (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,246) 1:A:21:LEU:C (1,156) 1:A:149:THR: (1,679) 1:A:156:HIS:C (1,324) 1:A:44:GLN:1 (1,603) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:27:ALA:C (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:83:GLY:C (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,374) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:1	1:A:141:GLU:N	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	14	27.62
1:A:22:ILE:N	(1,250) 1:A:22:ILE:N (1,527) 1:A:113:TYR: (1,374) 1:A:61:TYR:I (1,275) 1:A:30:GLU:I (1,523) 1:A:112:VAL: (1,242) 1:A:20:LEU:C (1,379) 1:A:62:PHE:I (1,12) 1:A:14:LEU:I (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,246) 1:A:21:LEU:C (1,156) 1:A:149:THR: (1,679) 1:A:156:HIS:C (1,324) 1:A:44:GLN:I (1,603) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:27:ALA:C (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:83:GLY:C (1,425) 1:A:77:VAL:N (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:N (1,379) 1:A:62:PHE:N (1,374) 1:A:61:TYR:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	3	27.62
13:TYR:N	(1,527) 1:A:113:TYR: (1,374) 1:A:61:TYR:I (1,275) 1:A:30:GLU:I (1,523) 1:A:112:VAL: (1,242) 1:A:20:LEU:C (1,379) 1:A:62:PHE:I (1,12) 1:A:14:LEU:I (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,246) 1:A:21:LEU:C (1,156) 1:A:149:THR: (1,679) 1:A:156:HIS:C (1,324) 1:A:44:GLN:I (1,603) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:27:ALA:C (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:83:GLY:C (1,425) 1:A:77:VAL:N (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:I (1,374) 1:A:61:TYR:I	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	1	27.61
61:TYR:N 1:A:61:TYR:CA 1:A:61:TYR:CB 1:A:61:TYR:CG 8 27.6 30:GLU:N 1:A:30:GLU:CA 1:A:30:GLU:CB 1:A:30:GLU:CG 2 27.57 112:VAL:N 1:A:112:VAL:CA 1:A:112:VAL:CB 1:A:112:VAL:CG1 1 27.56 10:LEU:CA 1:A:20:LEU:CB 1:A:20:LEU:CG 1:A:20:LEU:CD1 10 27.56 62:PHE:N 1:A:62:PHE:CA 1:A:62:PHE:CB 1:A:62:PHE:CG 20 27.55 14:LEU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:C 1:A:15:ALA:N 12 27.55 14:LEU:N 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 8 27.52 14:LEU:CA 1:A:42:ILEU:CB 1:A:42:ILEU:CD1 14 27.52 15:HIS:C 1:A:149:THR:CA 1:A:15:D:ARG:N 11 27.51 156:HIS:C 1:A:44:GLN:CA 1:A:149:THR:C 1:A:15:TGLU:C 6 27.49 44:GLN:N 1:A:44:GLN:CB 1:A:44:GLN:CG 2 27.49 138:ASN:N 1:A:17:MET:CB 1:A:45:LEU:CG 9 27.48	(1,374) 1:A:61:TYR:1 (1,275) 1:A:30:GLU:1 (1,523) 1:A:112:VAL: (1,242) 1:A:20:LEU:C (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,12) 1:A:14:LEU:1 (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,246) 1:A:21:LEU:C (1,156) 1:A:149:THR: (1,679) 1:A:156:HIS:C (1,324) 1:A:44:GLN:1 (1,603) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:27:ALA:C (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:83:GLY:C (1,425) 1:A:77:VAL:N (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:N (1,374) 1:A:61:TYR:N (1,374) 1:A:61:TYR:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	5	27.61
1:A:30:GLU:N	(1,275) 1:A:30:GLU:1 (1,523) 1:A:112:VAL: (1,242) 1:A:20:LEU:C (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,12) 1:A:14:LEU:C (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,246) 1:A:21:LEU:C (1,156) 1:A:149:THR: (1,679) 1:A:156:HIS:C (1,324) 1:A:44:GLN:1 (1,603) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:27:ALA:C (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:83:GLY:C (1,425) 1:A:77:VAL:N (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,562) 1:A:127:LEU:C (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:1	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	15	27.6
12:VAL:N	(1,523) 1:A:112:VAL: (1,242) 1:A:20:LEU:C (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,12) 1:A:14:LEU:C (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,246) 1:A:21:LEU:C (1,156) 1:A:149:THR: (1,679) 1:A:156:HIS:C (1,324) 1:A:44:GLN:1 (1,603) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:27:ALA:C (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:83:GLY:C (1,425) 1:A:77:VAL:N (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:1	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	8	27.6
100.LEU:CA 1:A:20:LEU:CB 1:A:20:LEU:CG 1:A:20:LEU:CD1 10 27.56 62:PHE:N 1:A:62:PHE:CA 1:A:62:PHE:CB 1:A:62:PHE:CG 20 27.55 14:LEU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:C 1:A:15:ALA:N 12 27.55 142:ILE:N 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 8 27.52 14:LEU:CA 1:A:42:ILEU:CG 1:A:21:LEU:CD1 14 27.52 14:LEU:CA 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:C 1:A:150:ARG:N 11 27.51 156:HIS:C 1:A:157:GLU:N 1:A:157:GLU:CA 1:A:157:GLU:C 6 27.49 44:GLN:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:44:GLN:CB 1:A:138:ASN:CG 2 27.49 138:ASN:N 1:A:138:ASN:CA 1:A:138:ASN:CB 1:A:138:ASN:CG 14 27.48 17:MET:N 1:A:417:MET:CA 1:A:4117:MET:CB 1:A:117:MET:CG 9 27.47 27:ALA:C 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CA 1:A:134:ILE:CD1 14 27.46 83:GLY:C 1:A:44:SER:N	(1,242) 1:A:20:LEU:C (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,12) 1:A:14:LEU:C (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,246) 1:A:21:LEU:C (1,156) 1:A:149:THR: (1,679) 1:A:156:HIS:C (1,324) 1:A:44:GLN:1 (1,603) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:27:ALA:C (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:83:GLY:C (1,425) 1:A:77:VAL:N (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,562) 1:A:127:LEU:C (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:1	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	2	27.57
62:PHE:N 1:A:62:PHE:CA 1:A:62:PHE:CB 1:A:62:PHE:CG 20 27.55 14:LEU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:C 1:A:15:ALA:N 12 27.55 442:ILE:N 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 8 27.52 42:LEU:CA 1:A:21:LEU:CB 1:A:42:ILE:CD1 14 27.52 49:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:C 1:A:150:ARG:N 11 27.51 156:HIS:C 1:A:157:GLU:N 1:A:157:GLU:CA 1:A:157:GLU:C 6 27.49 44:GLN:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:44:GLN:CB 1:A:44:GLN:CG 2 27.49 44:GLN:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:43:138:ASN:CB 1:A:138:ASN:CG 14 27.49 44:GLN:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:44:GLN:CG 2 27.49 44:GLN:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:138:ASN:CB 1:A:138:ASN:CG 14 27.48 55:LEU:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CB 1:A:41:TMET:CB 1:A:117:MET:CG 9 27.47 27:MET:N	(1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,12) 1:A:14:LEU:1 (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,246) 1:A:21:LEU:C (1,156) 1:A:149:THR: (1,679) 1:A:156:HIS:C (1,324) 1:A:44:GLN:1 (1,603) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:27:ALA:C (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:83:GLY:C (1,425) 1:A:77:VAL:N (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:N (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	1	27.56
14:LEU:N 1:A:14:LEU:CA 1:A:14:LEU:C 1:A:15:ALA:N 12 27.55 342:ILE:N 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 8 27.52 34:LEU:CA 1:A:21:LEU:CB 1:A:21:LEU:CD1 14 27.52 49:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:C 1:A:150:ARG:N 11 27.51 156:HIS:C 1:A:157:GLU:N 1:A:157:GLU:CA 1:A:157:GLU:C 6 27.49 44:GLN:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:44:GLN:CB 1:A:45:GLU:C 2 27.49 44:GLN:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:44:GLN:CB 1:A:44:GLN:CG 2 27.49 44:GLN:N 1:A:43:ASASN:CA 1:A:138:ASN:CB 1:A:138:ASN:CG 14 27.49 44:GLN:N 1:A:45:LEU:CB 1:A:138:ASN:CB 1:A:138:ASN:CG 14 27.48 55:LEU:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CG 1:A:45:LEU:CDI 9 27.47 27:MET:N 1:A:17:MET:CB 1:A:117:MET:CB 1:A:117:MET:CG 9 27.47 27:ALA:C 1:A:28:MET:N <td< td=""><td>(1,12) 1:A:14:LEU:1 (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,246) 1:A:21:LEU:C (1,156) 1:A:149:THR: (1,679) 1:A:156:HIS:C (1,324) 1:A:44:GLN:1 (1,603) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:27:ALA:C (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:83:GLY:C (1,425) 1:A:77:VAL:N (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:N (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:N</td><td>1:A:20:LEU:CB</td><td>1:A:20:LEU:CA</td><td>1:A:20:LEU:CG</td><td>1:A:20:LEU:CD1</td><td>10</td><td>27.56</td></td<>	(1,12) 1:A:14:LEU:1 (1,309) 1:A:42:ILE:N (1,246) 1:A:21:LEU:C (1,156) 1:A:149:THR: (1,679) 1:A:156:HIS:C (1,324) 1:A:44:GLN:1 (1,603) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:27:ALA:C (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:83:GLY:C (1,425) 1:A:77:VAL:N (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:N (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:N	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	10	27.56
42:ILE:N 1:A:42:ILE:CA 1:A:42:ILE:CB 1:A:42:ILE:CG1 8 27.52 41:LEU:CA 1:A:21:LEU:CB 1:A:21:LEU:CG 1:A:21:LEU:CD1 14 27.52 49:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:C 1:A:150:ARG:N 11 27.51 156:HIS:C 1:A:157:GLU:N 1:A:157:GLU:CA 1:A:157:GLU:C 6 27.49 44:GLN:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:44:GLN:CB 1:A:44:GLN:CG 2 27.49 43:ASN:N 1:A:138:ASN:CA 1:A:138:ASN:CB 1:A:43:B:ASN:CG 14 27.48 45:LEU:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CG 1:A:45:LEU:CD1 9 27.47 27:ALA:C 1:A:17:MET:CA 1:A:117:MET:CB 1:A:117:MET:CG 9 27.47 27:ALA:C 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:C 18 27.47 34:ILE:CA 1:A:134:ILE:CB 1:A:134:ILE:CG1 1:A:134:ILE:CD1 14 27.46 83:GLY:C 1:A:484:SER:N 1:A:84:SER:CA 1:A:46:LEU:CD1 4 27.44 40:HIS:C	(1,309) 1:A:42:ILE:N (1,246) 1:A:21:LEU:C (1,156) 1:A:149:THR: (1,679) 1:A:156:HIS:C (1,324) 1:A:44:GLN:I (1,603) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:27:ALA:C (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:83:GLY:C (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:C (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:C	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	20	27.55
1:LEU:CA	(1,246) 1:A:21:LEU:C (1,156) 1:A:149:THR: (1,679) 1:A:156:HIS:C (1,324) 1:A:44:GLN:I (1,603) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:27:ALA:C (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:83:GLY:C (1,425) 1:A:77:VAL:C (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:I (1,562) 1:A:127:LEU:C (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:I	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:C	1:A:15:ALA:N	12	27.55
49:THR:N 1:A:149:THR:C 1:A:150:ARG:N 11 27.51 156:HIS:C 1:A:157:GLU:N 1:A:157:GLU:CA 1:A:157:GLU:C 6 27.49 44:GLN:N 1:A:44:GLN:CB 1:A:44:GLN:CG 2 27.49 1:38:ASN:N 1:A:138:ASN:CA 1:A:138:ASN:CB 1:A:138:ASN:CG 14 27.48 5:LEU:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CG 1:A:45:LEU:CD1 9 27.48 17:MET:N 1:A:117:MET:CA 1:A:117:MET:CB 1:A:117:MET:CG 9 27.47 27:ALA:C 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:C 18 27.47 34:ILE:CA 1:A:134:ILE:CB 1:A:134:ILE:CG1 1:A:134:ILE:CD1 14 27.46 83:GLY:C 1:A:84:SER:N 1:A:84:SER:CA 1:A:84:SER:C 1 27.46 77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:CB 1:A:41:ASP:C 5 27.44 40:HIS:C 1:A:41:ASP:N 1:A:41:ASP:CB 1:A:41:ASP:C 5 27.43 27:LEU:CA 1:A:127:LEU:CB 1:A:46:LEU:CD 1	(1,156) 1:A:149:THR: (1,679) 1:A:156:HIS:0 (1,324) 1:A:44:GLN:1 (1,603) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:27:ALA:0 (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:83:GLY:0 (1,425) 1:A:77:VAL:N (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:N (1,562) 1:A:127:LEU:C (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	8	27.52
156:HIS:C 1:A:157:GLU:N 1:A:157:GLU:CA 1:A:157:GLU:C 6 27.49 44:GLN:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:44:GLN:CB 1:A:44:GLN:CG 2 27.49 138:ASN:N 1:A:138:ASN:CA 1:A:138:ASN:CB 1:A:138:ASN:CG 14 27.48 15:LEU:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CG 1:A:45:LEU:CD1 9 27.48 17:MET:N 1:A:117:MET:CA 1:A:117:MET:CB 1:A:117:MET:CG 9 27.47 27:ALA:C 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:C 18 27.47 34:ILE:CA 1:A:134:ILE:CB 1:A:134:ILE:CG1 1:A:134:ILE:CD1 14 27.46 83:GLY:C 1:A:84:SER:N 1:A:84:SER:CA 1:A:84:SER:C 1 27.46 77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:CB 1:A:77:VAL:CG1 4 27.44 40:HIS:C 1:A:41:ASP:N 1:A:41:ASP:CA 1:A:41:ASP:C 5 27.44 62:PHE:N 1:A:62:PHE:CA 1:A:127:LEU:CB 1:A:127:LEU:CD 1:A:127:LEU:CD1 4 27.42	(1,679) 1:A:156:HIS:((1,324) 1:A:44:GLN:1 (1,603) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:27:ALA:C (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:83:GLY:C (1,425) 1:A:77:VAL:N (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:N (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:N	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	14	27.52
44:GLN:N 1:A:44:GLN:CA 1:A:44:GLN:CB 1:A:44:GLN:CG 2 27.49 138:ASN:N 1:A:138:ASN:CA 1:A:138:ASN:CB 1:A:138:ASN:CG 14 27.48 5:LEU:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CG 1:A:45:LEU:CD1 9 27.48 17:MET:N 1:A:117:MET:CA 1:A:117:MET:CB 1:A:117:MET:CG 9 27.47 27:ALA:C 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:C 18 27.47 34:ILE:CA 1:A:134:ILE:CB 1:A:134:ILE:CG1 1:A:134:ILE:CD1 14 27.46 83:GLY:C 1:A:84:SER:N 1:A:84:SER:CA 1:A:84:SER:C 1 27.46 77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:CB 1:A:77:VAL:CG1 4 27.44 :40:HIS:C 1:A:41:ASP:N 1:A:41:ASP:CA 1:A:41:ASP:C 5 27.44 62:PHE:N 1:A:62:PHE:CA 1:A:62:PHE:CB 1:A:62:PHE:CB 3 27.43 27:LEU:CA 1:A:46:LEU:CB 1:A:46:LEU:CG 1:A:46:LEU:CD1 17 27.41	(1,679) 1:A:156:HIS:0 (1,324) 1:A:44:GLN:1 (1,603) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:27:ALA:0 (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:83:GLY:C (1,425) 1:A:77:VAL:N (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:N (1,562) 1:A:127:LEU:C (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:C	1:A:150:ARG:N	11	27.51
138:ASN:N 1:A:138:ASN:CA 1:A:138:ASN:CB 1:A:138:ASN:CG 14 27.48 .5:LEU:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CG 1:A:45:LEU:CD1 9 27.48 17:MET:N 1:A:117:MET:CA 1:A:117:MET:CB 1:A:117:MET:CG 9 27.47 27:ALA:C 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:C 18 27.47 34:ILE:CA 1:A:134:ILE:CB 1:A:134:ILE:CG1 1:A:134:ILE:CD1 14 27.46 83:GLY:C 1:A:84:SER:N 1:A:84:SER:CA 1:A:84:SER:C 1 27.46 77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:CB 1:A:77:VAL:CG1 4 27.44 :40:HIS:C 1:A:41:ASP:N 1:A:41:ASP:CA 1:A:41:ASP:C 5 27.44 62:PHE:N 1:A:62:PHE:CA 1:A:62:PHE:CB 1:A:62:PHE:CG 3 27.43 27:LEU:CA 1:A:127:LEU:CB 1:A:127:LEU:CG 1:A:46:LEU:CD1 4 27.42 66:LEU:CA 1:A:46:LEU:CB 1:A:46:LEU:CG 1:A:46:LEU:CD1 17 27.41	(1,603) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:27:ALA:C (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:83:GLY:C (1,425) 1:A:40:HIS:C (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:1		1:A:156:HIS:C			6	
5:LEU:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CG 1:A:45:LEU:CD1 9 27.48 17:MET:N 1:A:117:MET:CA 1:A:117:MET:CB 1:A:117:MET:CG 9 27.47 27:ALA:C 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:C 18 27.47 34:ILE:CA 1:A:134:ILE:CB 1:A:134:ILE:CG1 1:A:134:ILE:CD1 14 27.46 83:GLY:C 1:A:84:SER:N 1:A:84:SER:CA 1:A:84:SER:C 1 27.46 77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:CB 1:A:77:VAL:CG1 4 27.44 :40:HIS:C 1:A:41:ASP:N 1:A:41:ASP:CA 1:A:41:ASP:C 5 27.44 62:PHE:N 1:A:62:PHE:CA 1:A:62:PHE:CB 1:A:62:PHE:CG 3 27.43 27:LEU:CA 1:A:127:LEU:CB 1:A:127:LEU:CD 1:A:46:LEU:CD1 4 27.42 66:LEU:CA 1:A:46:LEU:CB 1:A:46:LEU:CG 1:A:46:LEU:CD1 17 27.41	(1,603) 1:A:138:ASN: (1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:27:ALA:C (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:83:GLY:C (1,425) 1:A:40:HIS:C (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:1	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	2	27.49
5:LEU:CA 1:A:45:LEU:CB 1:A:45:LEU:CG 1:A:45:LEU:CD1 9 27.48 17:MET:N 1:A:117:MET:CA 1:A:117:MET:CB 1:A:117:MET:CG 9 27.47 27:ALA:C 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:C 18 27.47 34:ILE:CA 1:A:134:ILE:CB 1:A:134:ILE:CG1 1:A:134:ILE:CD1 14 27.46 83:GLY:C 1:A:84:SER:N 1:A:84:SER:CA 1:A:84:SER:C 1 27.46 77:VAL:N 1:A:7:VAL:CA 1:A:77:VAL:CB 1:A:77:VAL:CG1 4 27.44 :40:HIS:C 1:A:41:ASP:N 1:A:41:ASP:CA 1:A:41:ASP:C 5 27.44 62:PHE:N 1:A:62:PHE:CA 1:A:62:PHE:CB 1:A:62:PHE:CG 3 27.43 27:LEU:CA 1:A:127:LEU:CB 1:A:127:LEU:CG 1:A:46:LEU:CD1 4 27.42 :6:LEU:CA 1:A:46:LEU:CB 1:A:46:LEU:CG 1:A:46:LEU:CD1 17 27.41	(1,331) 1:A:45:LEU:C (1,537) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:27:ALA:C (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:83:GLY:C (1,425) 1:A:77:VAL:C (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:C (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:C	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CB	1:A:138:ASN:CG	14	27.48
17:MET:N 1:A:117:MET:CA 1:A:117:MET:CB 1:A:117:MET:CG 9 27.47 27:ALA:C 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:C 18 27.47 34:ILE:CA 1:A:134:ILE:CB 1:A:134:ILE:CG1 1:A:134:ILE:CD1 14 27.46 83:GLY:C 1:A:84:SER:N 1:A:84:SER:CA 1:A:84:SER:C 1 27.46 77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:CB 1:A:77:VAL:CG1 4 27.44 40:HIS:C 1:A:41:ASP:N 1:A:41:ASP:CA 1:A:41:ASP:C 5 27.44 62:PHE:N 1:A:62:PHE:CA 1:A:62:PHE:CB 1:A:62:PHE:CG 3 27.43 27:LEU:CA 1:A:127:LEU:CB 1:A:127:LEU:CD1 4 27.42 .6:LEU:CA 1:A:46:LEU:CB 1:A:46:LEU:CG 1:A:46:LEU:CD1 17 27.41	(1,537) 1:A:117:MET: (1,264) 1:A:27:ALA:0 (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:83:GLY:0 (1,425) 1:A:77:VAL:0 (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:0 (1,562) 1:A:127:LEU:C (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:0		1:A:45:LEU:CA				
27:ALA:C 1:A:28:MET:N 1:A:28:MET:CA 1:A:28:MET:C 18 27.47 34:ILE:CA 1:A:134:ILE:CB 1:A:134:ILE:CG1 1:A:134:ILE:CD1 14 27.46 83:GLY:C 1:A:84:SER:N 1:A:84:SER:CA 1:A:84:SER:C 1 27.46 77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:CB 1:A:77:VAL:CG1 4 27.44 :40:HIS:C 1:A:41:ASP:N 1:A:41:ASP:CA 1:A:41:ASP:C 5 27.44 62:PHE:N 1:A:62:PHE:CA 1:A:62:PHE:CB 1:A:62:PHE:CG 3 27.43 27:LEU:CA 1:A:127:LEU:CB 1:A:127:LEU:CG 1:A:127:LEU:CD1 4 27.42 66:LEU:CA 1:A:46:LEU:CB 1:A:46:LEU:CG 1:A:46:LEU:CD1 17 27.41	(1,264) 1:A:27:ALA:0 (1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:83:GLY:0 (1,425) 1:A:77:VAL:N (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:N (1,562) 1:A:127:LEU:C (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:N		1:A:117:MET:N		1:A:117:MET:CG		
34:ILE:CA 1:A:134:ILE:CB 1:A:134:ILE:CG1 1:A:134:ILE:CD1 14 27.46 83:GLY:C 1:A:84:SER:N 1:A:84:SER:CA 1:A:84:SER:C 1 27.46 77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:CB 1:A:77:VAL:CG1 4 27.44 :40:HIS:C 1:A:41:ASP:N 1:A:41:ASP:CA 1:A:41:ASP:C 5 27.44 62:PHE:N 1:A:62:PHE:CA 1:A:62:PHE:CB 1:A:62:PHE:CG 3 27.43 27:LEU:CA 1:A:127:LEU:CB 1:A:127:LEU:CG 1:A:127:LEU:CD1 4 27.42 66:LEU:CA 1:A:46:LEU:CB 1:A:46:LEU:CG 1:A:46:LEU:CD1 17 27.41	(1,582) 1:A:134:ILE:C (1,448) 1:A:83:GLY:C (1,425) 1:A:77:VAL:N (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:N (1,562) 1:A:127:LEU:C (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:N		1:A:27:ALA:C				
83:GLY:C 1:A:84:SER:N 1:A:84:SER:CA 1:A:84:SER:C 1 27.46 77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:CB 1:A:77:VAL:CG1 4 27.44 :40:HIS:C 1:A:41:ASP:N 1:A:41:ASP:CA 1:A:41:ASP:C 5 27.44 62:PHE:N 1:A:62:PHE:CA 1:A:62:PHE:CB 1:A:62:PHE:CG 3 27.43 27:LEU:CA 1:A:127:LEU:CB 1:A:127:LEU:CG 1:A:127:LEU:CD1 4 27.42 66:LEU:CA 1:A:46:LEU:CB 1:A:46:LEU:CG 1:A:46:LEU:CD1 17 27.41	(1,448) 1:A:83:GLY:((1,425) 1:A:77:VAL:1 (1,302) 1:A:40:HIS:((1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,562) 1:A:127:LEU:((1,337) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:1		1:A:134:ILE:CA				
77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:CB 1:A:77:VAL:CG1 4 27.44 :40:HIS:C 1:A:41:ASP:N 1:A:41:ASP:CA 1:A:41:ASP:C 5 27.44 62:PHE:N 1:A:62:PHE:CA 1:A:62:PHE:CB 1:A:62:PHE:CG 3 27.43 27:LEU:CA 1:A:127:LEU:CB 1:A:127:LEU:CG 1:A:127:LEU:CD1 4 27.42 6:LEU:CA 1:A:46:LEU:CB 1:A:46:LEU:CG 1:A:46:LEU:CD1 17 27.41	(1,425) 1:A:77:VAL:N (1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:N (1,562) 1:A:127:LEU:C (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:N		1:A:83:GLY:C				
:40:HIS:C 1:A:41:ASP:N 1:A:41:ASP:CA 1:A:41:ASP:C 5 27.44 :62:PHE:N 1:A:62:PHE:CA 1:A:62:PHE:CB 1:A:62:PHE:CG 3 27.43 27:LEU:CA 1:A:127:LEU:CB 1:A:127:LEU:CG 1:A:127:LEU:CD1 4 27.42 :6:LEU:CA 1:A:46:LEU:CB 1:A:46:LEU:CG 1:A:46:LEU:CD1 17 27.41	(1,302) 1:A:40:HIS:C (1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,562) 1:A:127:LEU:C (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:1		1:A:77:VAL:N				
62:PHE:N 1:A:62:PHE:CA 1:A:62:PHE:CB 1:A:62:PHE:CG 3 27.43 27:LEU:CA 1:A:127:LEU:CB 1:A:127:LEU:CG 1:A:127:LEU:CD1 4 27.42 6:LEU:CA 1:A:46:LEU:CB 1:A:46:LEU:CG 1:A:46:LEU:CD1 17 27.41	(1,379) 1:A:62:PHE:1 (1,562) 1:A:127:LEU:C (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:1		1:A:40:HIS:C				
27:LEU:CA 1:A:127:LEU:CB 1:A:127:LEU:CG 1:A:127:LEU:CD1 4 27.42 6:LEU:CA 1:A:46:LEU:CB 1:A:46:LEU:CG 1:A:46:LEU:CD1 17 27.41	(1,562) 1:A:127:LEU:C (1,337) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:1						
6:LEU:CA 1:A:46:LEU:CB 1:A:46:LEU:CG 1:A:46:LEU:CD1 17 27.41	(1,337) 1:A:46:LEU:C (1,374) 1:A:61:TYR:1						
	(1,374) 1:A:61:TYR:I						
$\sigma_{21}, \sigma_{21}, \sigma_{32}, \sigma_{33}, \sigma_{34}, \sigma_{3$	· / /						27.4
	- (1.331) 1:A:45:LEU:C						
	(' /	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CB	1:A:138:ASN:CG	3	27.37
	(1,331) 1:A:45:LEU:C	1:A:62:PHE:CA 1:A:127:LEU:CB 1:A:46:LEU:CB 1:A:61:TYR:CA	1:A:40:HIS:C 1:A:62:PHE:N 1:A:127:LEU:CA 1:A:46:LEU:CA 1:A:61:TYR:N 1:A:45:LEU:CA	1:A:62:PHE:CB 1:A:127:LEU:CG 1:A:46:LEU:CG 1:A:61:TYR:CB	1:A:62:PHE:CG 1:A:127:LEU:CD1 1:A:46:LEU:CD1 1:A:61:TYR:CG	3 4 17 4	27.4 27.4 27.4 27.4



	ed from previous pag		A	A 1	N.F. 1.1	3 7° 1 . 4° ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,367)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	20	27.37
(1,207)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	1	27.37
(1,286)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	8	27.36
(1,269)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	20	27.36
(1,247)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	4	27.36
(1,643)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	3	27.35
(1,380)	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	1:A:62:PHE:CD1	15	27.34
(1,470)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	19	27.33
(1,56)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ALA:N	13	27.32
(1,453)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	9	27.32
(1,281)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	17	27.32
(1,205)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	8	27.3
(1,342)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:GLY:N	1:A:48:GLY:CA	1:A:48:GLY:C	16	27.29
(1,654)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	13	27.28
(1,310)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1	27.28
(1,275)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	20	27.28
(1,671)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	12	27.27
(1,441)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	3	27.26
(1,425)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:CB	1:A:77:VAL:CG1	6	27.26
(1,393)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	13	27.26
(1,666)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	11	27.25
(1,528)	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	1:A:113:TYR:CD1	12	27.23
(1,394)	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	3	27.22
(1,248)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	17	27.22
(1,673)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	16	27.2
(1,379)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	5	27.2
(1,88)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	3	27.19
(1,638)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	11	27.19
(1,674)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	9	27.18
(1,578)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	2	27.18
(1,309)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	4	27.18
(1,579)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	3	27.15
(1,554)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	7	27.15
(1,614)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	14	27.14
(1,489)			1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	4	27.13
(1,393)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	5	27.13
(1,309)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	2	27.13
(1,305)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	12	27.12
(1,651)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	13	27.11
(1,12)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:C	1:A:15:ALA:N	20	27.1
(1,659)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	2	27.09
(1,685)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	13	27.08
(1,000) $(1,248)$	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	10	27.08
(1,246) $(1,206)$	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	19	27.08
(1,260) $(1,156)$	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:C	1:A:150:ARG:N	18	27.07
(1,130) $(1,318)$	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	10	27.05
(1,80)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	14	27.04
(1,30) $(1,215)$	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	17	27.04
(1,213) $(1,686)$	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	12	27.04
(1,080) $(1,176)$	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	2	27.03
(1,170) $(1,580)$	1:A:134:ILE:N	1:A:33:FHE:CA 1:A:134:ILE:CA	1:A:33:FHE:CB	1:A:134:ILE:CG1	19	27.02
(1,560)	1:A:154:ILE:IN	1:A:134:ILE:UA	1:A:194:ILE:UB	1:A:194:ILE:UGI		ad an nant mass



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,261)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	10	27.0
(1,308)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	5	26.99
(1,318)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	18	26.98
(1,281)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	9	26.98
(1,265)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	2	26.98
(1,572)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	11	26.96
(1,525)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	20	26.94
(1,597)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	3	26.93
(1,516)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	9	26.93
(1,429)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	4	26.93
(1,543)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	3	26.92
(1,516)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	10	26.91
(1,249)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	14	26.89
(1,193)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	3	26.89
(1,540)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	9	26.88
(1,534)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	9	26.88
(1,294)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	19	26.88
(1,611)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	11	26.87
(1,491)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	11	26.87
(1,543)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	9	26.86
(1,362)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	3	26.86
(1,221)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	19	26.85
(1,72)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	17	26.84
(1,601)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	6	26.83
(1,460)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	9	26.83
(1,220)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	17	26.83
(1,362)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	4	26.82
(1,582)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	15	26.81
(1,206)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	16	26.81
(1,339)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	7	26.8
(1,354)	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	1:A:51:LYS:CD	7	26.79
(1,356)	1:A:53:PRO:N	1:A:53:PRO:CA	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	2	26.78
(1,180)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	6	26.77
(1,666)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	10	26.76
(1,491)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	13	26.76
(1,619)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	18	26.74
(1,634)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	18	26.73
(1,622)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	18	26.72
(1,543)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	17	26.7
(1,594)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	6	26.69
(1,600)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	4	26.67
(1,250)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	2	26.67
(1,450)	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	1:A:85:GLY:CA	1:A:85:GLY:C	12	26.66
(1,330)	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	13	26.66
(1,205)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	17	26.66
(1,537)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	7	26.65
(1,679)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	20	26.62
(1,415)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	10	26.62
(1,619)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	14	26.61
(1,224)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	20	26.61
(1,266)	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	4	26.6
() ==/						ed on nert nage



	ed from previous pag		A /		36 11	T 71 1
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,685)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	11	26.59
(1,229)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	20	26.59
(1,482)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	3	26.56
(1,222)	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	1:A:12:LYS:CD	17	26.56
(1,339)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	3	26.55
(1,32)	1:A:27:ALA:N	1:A:27:ALA:CA	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	13	26.55
(1,592)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	16	26.54
(1,484)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	14	26.53
(1,425)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:CB	1:A:77:VAL:CG1	20	26.53
(1,441)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	12	26.52
(1,498)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	12	26.51
(1,239)	1:A:18:PRO:N	1:A:18:PRO:CA	1:A:18:PRO:C	1:A:19:ALA:N	10	26.51
(1,519)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	9	26.5
(1,398)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	10	26.5
(1,362)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	18	26.5
(1,189)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	16	26.5
(1,441)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	13	26.49
(1,425)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:CB	1:A:77:VAL:CG1	17	26.48
(1,428)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	19	26.45
(1,356)	1:A:53:PRO:N	1:A:53:PRO:CA	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	4	26.45
(1,224)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	6	26.45
(1,269)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	4	26.43
(1,465)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	17	26.41
(1,292)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	7	26.4
(1,56)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ALA:N	5	26.38
(1,418)	1:A:73:PHE:C	1:A:74:GLY:N	1:A:74:GLY:CA	1:A:74:GLY:C	20	26.38
(1,367)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	1	26.38
(1,302)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	8	26.38
(1,206)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	7	26.38
(1,643)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	20	26.37
(1,622)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	15	26.37
(1,535)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	3	26.37
(1,523)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	18	26.35
(1,628)	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	6	26.34
(1,206)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	11	26.32
(1,540)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	12	26.31
(1,395)	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	1	26.31
(1,301)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	9	26.31
(1,334)	1:A:45:LEU:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	14	26.3
(1,392)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	3	26.29
(1,654)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	20	26.28
(1,626)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	19	26.28
(1,320)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	3	26.27
(1,489)	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	3	26.26
(1,674)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	15	26.22
(1,562)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	12	26.22
(1,460)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	18	26.21
(1,331)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	4	26.2
(1,678)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	11	26.19
· · /				1:A:154:MET:C	1	26.19
(1,660)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1.A.194.ME1.C	L	20.19



	ed from previous pag		A 4	A 1	N.F. 1.1	T 7* . 1 . 4*
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,188)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	3	26.18
(1,297)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	17	26.17
(1,236)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	5	26.17
(1,658)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	19	26.15
(1,658)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	4	26.14
(1,281)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	18	26.14
(1,363)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	19	26.13
(1,336)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	5	26.13
(1,166)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	6	26.13
(1,674)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	4	26.12
(1,512)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	20	26.11
(1,379)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	10	26.11
(1,663)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	17	26.09
(1,617)	1:A:141:GLU:C	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	5	26.08
(1,314)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	11	26.08
(1,217)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	10	26.07
(1,543)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	12	26.06
(1,516)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	19	26.06
(1,327)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	1	26.05
(1,603)	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:CB	1:A:138:ASN:CG	12	26.04
(1,617)	1:A:141:GLU:C	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	16	26.03
(1,580)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	5	26.02
(1,239)	1:A:18:PRO:N	1:A:18:PRO:CA	1:A:18:PRO:C	1:A:19:ALA:N	1	26.02
(1,211)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	14	26.02
(1,682)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	9	25.99
(1,591)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	11	25.99
(1,327)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	6	25.99
(1,306)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	7	25.99
(1,516)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	13	25.98
(1,258)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	13	25.98
(1,678)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	20	25.97
(1,523)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	19	25.97
(1,306)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	14	25.97
(1,208)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	13	25.97
(1,84)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	8	25.95
(1,524)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	13	25.94
(1,354)	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	1:A:51:LYS:CD	13	25.94
(1,385)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	2	25.93
(1,279)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1	25.92
(1,164)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	10	25.91
(1,585)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	4	25.89
(1,608)	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	1:A:140:ALA:CA	1:A:140:ALA:C	17	25.88
(1,228)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	17	25.87
(1,620)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	17	25.86
(1,156)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:C	1:A:150:ARG:N	10	25.85
(1,78)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	16	25.84
(1,13) $(1,434)$	1:A:79:GLY:C	1:A:80:GLY:N	1:A:80:GLY:CA	1:A:80:GLY:C	11	25.84
(1,434) $(1,572)$	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	5	25.82
(1,540)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	15	25.82
(1,608)	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	1:A:140:ALA:CA	1:A:140:ALA:C	11	25.81
(1,460)	1:A:139:FRO:C 1:A:87:VAL:N	1:A:140:ALA:N 1:A:87:VAL:CA	1:A:140:ALA:CA 1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	10	25.81
(1,400)	1.A.01. VAL:IN	1.A.01. VAL.UA	1.A.01.VAL:OD	1.A.or. VAL.OGI		20.01



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,472)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	7	25.8
(1,450)	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	1:A:85:GLY:CA	1:A:85:GLY:C	11	25.79
(1,259)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	1	25.79
(1,257)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	5	25.79
(1,407)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:CB	1:A:71:VAL:CG1	10	25.78
(1,362)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	1	25.78
(1,569)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	8	25.76
(1,504)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	4	25.76
(1,442)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:CB	1:A:82:GLU:CG	18	25.75
(1,572)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	2	25.74
(1,597)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	15	25.72
(1,561)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	2	25.72
(1,518)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	14	25.72
(1,383)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	15	25.72
(1,601)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	8	25.71
(1,480)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	10	25.71
(1,410)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	17	25.71
(1,312)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	6	25.71
(1,187)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	20	25.71
(1,666)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	7	25.69
(1,448)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	12	25.67
(1,19)	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	13	25.67
(1,258)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	2	25.66
(1,223)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	9	25.66
(1,519)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	4	25.64
(1,337)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	15	25.63
(1,654)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	11	25.62
(1,84)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	19	25.59
(1,619)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	9	25.59
(1,562)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	15	25.58
(1,363)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	11	25.58
(1,297)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	3	25.58
(1,80)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	1	25.57
(1,568)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	2	25.57
(1,257)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA		1:A:24:THR:OG1	10	25.57
(1,645)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	12	25.56
(1,622)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	17	25.54
(1,516)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	12	25.53
(1,512)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	3	25.53
(1,614)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	11	25.52
(1,302)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	14	25.52
(1,302) $(1,172)$	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	2	25.52
(1,578)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	13	25.51
(1,460)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	17	25.51
(1,172)	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	15	25.51
(1,172) $(1,425)$	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:CB	1:A:77:VAL:CG1	15	25.5
(1,398)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	9	25.5
(1,506)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	14	25.48
(1,453)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	2	25.48
(1,236)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	8	25.48
(1,362)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	10	25.47
(1,002)	1.11.00.GH1.IV	1.71.00.011.071	1.11.00.011.0	1.11.00.1 100.11		ed on nert nage



Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,222)	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	1:A:12:LYS:CD	5	25.47
(1,494)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	11	25.46
(1,395)	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	7	25.46
(1,579)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	14	25.45
(1,307)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	15	25.45
(1,671)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	18	25.42
(1,504)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	16	25.42
(1,339)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	18	25.4
(1,256)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	19	25.4
(1,294)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	15	25.38
(1,572)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	9	25.37
(1,72)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	14	25.33
(1,682)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	14	25.33
(1,191)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	2	25.33
(1,398)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	4	25.32
(1,517)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	2	25.31
(1,649)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	18	25.3
(1,498)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	16	25.3
(1,342)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:GLY:N	1:A:48:GLY:CA	1:A:48:GLY:C	11	25.3
(1,419)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	13	25.29
(1,287)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	16	25.27
(1,237) $(1,172)$	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	3	25.27
(1,112) $(1,312)$	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	3	25.26
(1,812) $(1,80)$	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	18	25.23
(1,36) $(1,236)$	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	10	25.23
(1,230) $(1,229)$	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	15	25.21
(1,229) $(1,206)$	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	20	25.21
(1,200) $(1,506)$	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	20	25.21
(1,300) $(1,176)$	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	4	25.2
(1,170) $(1,642)$	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	1	25.18
(1,042) $(1,516)$	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	16	25.17
(1,370) $(1,371)$	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	18	25.17
(1,371) $(1,236)$	1:A:17:VAL:N	1:A:00:ARG:CA 1:A:17:VAL:CA	1:A:00:ARG:CB	1:A:17:VAL:CG1	12	25.17
(1,230) $(1,672)$	1:A:17:VAL:N 1:A:155:LEU:N	1:A:17:VAL:CA 1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:17:VAL:CG1 1:A:156:HIS:N	3	25.13
(/ /	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA		1:A:110:GLU:CG	19	25.13
(1,520)	1:A:110:GLU:N 1:A:69:PHE:N	1:A:110:GLU:CA 1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:110:GE0:CG 1:A:69:PHE:CG	7	25.12
(1,399) $(1,596)$	1:A:09:PHE:N 1:A:136:LEU:N	1:A:09:PHE:CA 1:A:136:LEU:CA	1:A:09:PHE:CB 1:A:136:LEU:C	1:A:09:PHE:CG 1:A:137:ASP:N	9	25.11
(1,390) $(1,324)$	1:A:44:GLN:N	1:A:150:LEU:CA 1:A:44:GLN:CA	1:A:130:LEU:C 1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	11	25.07
(1,324) $(1,483)$	1:A:96:LYS:CA	1:A:44:GLN:CA 1:A:96:LYS:CB	1:A:44:GLN:CB 1:A:96:LYS:CG	1:A:44:GLN:CG 1:A:96:LYS:CD	9	25.06
(' /	1:A:90:LYS:CA 1:A:137:ASP:C	1:A:96:LYS:CB 1:A:138:ASN:N	1:A:96:LYS:CG 1:A:138:ASN:CA		2	25.04
(1,602)				1:A:138:ASN:C 1:A:45:LEU:C		
(1,327)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA		16	25.04
(1,527)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	14	25.03
(1,494)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	18	25.03
(1,621)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	8	25.02
(1,254)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	1	25.01
(1,513)	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	14	25.0
(1,224)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	16	25.0
(1,80)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	13	24.99
(1,352)	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:CB	1:A:51:LYS:CG	5	24.98
(1,342)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:GLY:N	1:A:48:GLY:CA	1:A:48:GLY:C	3	24.98
(1,495)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	18	24.97



	ed from previous pag		A	A / A	N.F. 1.1	T 7* 1 .
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,236)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	6	24.97
(1,81)	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	9	24.96
(1,597)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	1	24.94
(1,523)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	7	24.93
(1,589)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	17	24.9
(1,16)	1:A:19:ALA:N	1:A:19:ALA:CA	1:A:19:ALA:C	1:A:20:LEU:N	6	24.89
(1,327)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	17	24.88
(1,207)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	2	24.88
(1,516)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	3	24.84
(1,520)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	15	24.83
(1,457)	1:A:86:ARG:C	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:C	13	24.83
(1,314)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	20	24.83
(1,671)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	19	24.82
(1,608)	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	1:A:140:ALA:CA	1:A:140:ALA:C	4	24.82
(1,205)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	1	24.81
(1,491)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	8	24.8
(1,471)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	18	24.8
(1,309)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	15	24.79
(1,410)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	19	24.78
(1,164)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	8	24.78
(1,207)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	7	24.76
(1,294)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	4	24.75
(1,236)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	14	24.75
(1,387)	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	1:A:64:MET:SD	16	24.72
(1,643)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	15	24.71
(1,294)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	11	24.71
(1,374)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	16	24.7
(1,398)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	11	24.69
(1,398)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	20	24.69
(1,337)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	14	24.69
(1,331)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	3	24.69
(1,651)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	5	24.68
(1,646)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	18	24.68
(1,040) $(1,228)$	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	11	24.68
(1,519)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	11	24.67
(1,513) $(1,513)$	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:CB	1:A:108:GLU:CG	17	24.65
(1,313) $(1,339)$	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	12	24.65
(1,359) $(1,257)$	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	13	24.65
` ′	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	18	
(1,411) $(1,379)$	1:A:62:PHE:N	1:A:72:GLU:CA 1:A:62:PHE:CA	1:A:72:GLU:CB 1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	9	24.64 24.64
/	1:A:02:PHE:N 1:A:134:ILE:N	1:A:02:PHE:CA 1:A:134:ILE:CA	1:A:02:PHE:CB 1:A:134:ILE:CB	1:A:02:PHE:CG 1:A:134:ILE:CG1	20	24.63
(1,580)	1:A:134:ILE:N 1:A:88:VAL:C	1:A:134:ILE:CA 1:A:89:THR:N		1:A:134:ILE:CG1 1:A:89:THR:C		
(1,81)			1:A:89:THR:CA		3	24.62
(1,685)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	9	24.62
(1,518)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	2	24.6
(1,679)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	15	24.59
(1,575)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	2	24.57
(1,448)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	7	24.57
(1,212)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	8	24.56
(1,495)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	11	24.54
(1,459)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	6	24.53
(1,363)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	10	24.53



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,246)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	7	24.53
(1,519)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	5	24.51
(1,518)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	19	24.5
(1,580)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	13	24.49
(1,534)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	2	24.49
(1,342)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:GLY:N	1:A:48:GLY:CA	1:A:48:GLY:C	14	24.48
(1,251)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	9	24.46
(1,649)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	5	24.45
(1,649)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	7	24.45
(1,465)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	18	24.45
(1,666)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	13	24.44
(1,331)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	18	24.44
(1,294)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	16	24.43
(1,582)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	1	24.42
(1,362)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	11	24.42
(1,620)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	9	24.41
(1,383)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	19	24.39
(1,524)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	4	24.38
(1,556)	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:CB	1:A:125:PHE:CG	1:A:125:PHE:CD1	5	24.37
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	9	24.37
(1,645)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	2	24.36
(1,176)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	9	24.35
(1,446)	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	1:A:83:GLY:CA	1:A:83:GLY:C	19	24.33
(1,309)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	11	24.33
(1,339)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	14	24.3
(1,638)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	5	24.29
(1,454)	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	13	24.26
(1,242)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	17	24.26
(1,374)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	3	24.25
(1,483)	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	1:A:96:LYS:CD	18	24.24
(1,477)	1:A:93:PRO:N	1:A:93:PRO:CA	1:A:93:PRO:C	1:A:94:SER:N	1	24.24
(1,319)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	3	24.24
(1,363)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	1	24.22
(1,186)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	10	24.2
(1,460)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	20	24.19
(1,286)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	4	24.19
(1,635)	1:A:146:GLN:N	1:A:146:GLN:CA	1:A:146:GLN:CB	1:A:146:GLN:CG	16	24.18
(1,371)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	8	24.18
(1,331)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	13	24.18
(1,269)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	19	24.17
(1,16)	1:A:19:ALA:N	1:A:19:ALA:CA	1:A:19:ALA:C	1:A:20:LEU:N	7	24.17
(1,619)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	17	24.14
(1,239)	1:A:18:PRO:N	1:A:18:PRO:CA	1:A:18:PRO:C	1:A:19:ALA:N	18	24.14
(1,551)	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:CB	1:A:122:ASP:CG	7	24.12
(1,321)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	7	24.12
(1,188)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	17	24.12
(1,450)	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	1:A:85:GLY:CA	1:A:85:GLY:C	1	24.11
(1,164)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	12	24.11
(1,104) $(1,491)$	1:A:103:EE0:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	7	24.09
(1,131) $(1,578)$	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	9	24.08
(1,568)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	9	24.07
(1,000)	1.11.100.010.11	1.11.130.010.011	1.11.130.GEC.CD	1.11.130.010.00		24.01



	ed from previous pag		A	A	3.6 1.1	T 7* 1 4* ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,367)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	7	24.07
(1,332)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	14	24.07
(1,677)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	11	24.05
(1,262)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	4	24.05
(1,229)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	18	24.05
(1,460)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	7	24.04
(1,455)	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:CB	1:A:86:ARG:CG	1:A:86:ARG:CD	19	24.02
(1,339)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	5	24.02
(1,263)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	1	24.02
(1,520)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	11	24.01
(1,491)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	10	24.01
(1,451)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	13	24.0
(1,685)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	15	23.99
(1,450)	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	1:A:85:GLY:CA	1:A:85:GLY:C	10	23.98
(1,191)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	20	23.98
(1,286)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	13	23.96
(1,167)	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	1:A:1:MET:SD	9	23.96
(1,498)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	19	23.95
(1,208)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	16	23.95
(1,320)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	9	23.94
(1,491)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	18	23.91
(1,411)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	20	23.91
(1,558)	1:A:126:ASP:N	1:A:126:ASP:CA	1:A:126:ASP:CB	1:A:126:ASP:CG	6	23.9
(1,379)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	16	23.9
(1,685)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	8	23.89
(1,491)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	3	23.89
(1,446)	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	1:A:83:GLY:CA	1:A:83:GLY:C	3	23.89
(1,301)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	7	23.89
(1,666)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	2	23.88
(1,372)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	2	23.87
(1,362)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	19	23.87
(1,297)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	13	23.86
(1,451)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	16	23.84
(1,392)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	19	23.83
(1,572)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	6	23.8
(1,367)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	11	23.79
(1,286)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	18	23.78
(1,162)	1:A:152:SER:N	1:A:152:SER:CA	1:A:152:SER:C	1:A:153:LEU:N	17	23.78
(1,460)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	16	23.77
(1,236)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	4	23.77
(1,252)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	4	23.76
(1,173)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	18	23.76
(1,200)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	13	23.75
(1,198)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	11	23.74
(1,474)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	3	23.73
(1,457)	1:A:86:ARG:C	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:C	12	23.72
(1,649)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	10	23.71
(1,176)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:CB	1:A:3:PHE:CG	6	23.7
(1,88)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	14	23.69
(1,336)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	1	23.69
(1,649)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	11	23.68
(1,010)	1.11.110.11110.11	1.11.110.11110.011		1.11.110.11116.001		20.00



	$\frac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom 2	Atom 1	Model	Violetion (a)
Key			Atom-3	Atom-4		Violation (o)
(1,253)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	8	23.68
(1,206)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	4	23.68
(1,290)	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	1:A:35:PHE:CD1	19	23.67
(1,651)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	10	23.65
(1,562)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	6	23.65
(1,297)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	10	23.6
(1,682)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	7	23.59
(1,372)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	13	23.59
(1,465)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	20	23.54
(1,414)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	13	23.54
(1,367)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	6	23.54
(1,477)	1:A:93:PRO:N	1:A:93:PRO:CA	1:A:93:PRO:C	1:A:94:SER:N	17	23.53
(1,622)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	9	23.51
(1,524)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	9	23.51
(1,638)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	9	23.5
(1,426)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	8	23.5
(1,363)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	18	23.5
(1,336)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	9	23.5
(1,269)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	12	23.49
(1,19)	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	1	23.48
(1,650)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	15	23.47
(1,19)	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	11	23.47
(1,685)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	19	23.46
(1,16)	1:A:19:ALA:N	1:A:19:ALA:CA	1:A:19:ALA:C	1:A:20:LEU:N	3	23.46
(1,84)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	12	23.45
(1,506)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	4	23.45
(1,310)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	13	23.44
(1,323)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	8	23.43
(1,193)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	14	23.43
(1,350)	1:A:49:GLN:C	1:A:50:GLY:N	1:A:50:GLY:CA	1:A:50:GLY:C	9	23.42
(1,193)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:CB	1:A:6:GLN:CG	11	23.42
(1,603)	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:CB	1:A:138:ASN:CG	2	23.4
(1,519)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	10	23.4
(1,620)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	14	23.39
(1,418)	1:A:73:PHE:C	1:A:74:GLY:N	1:A:74:GLY:CA	1:A:74:GLY:C	5	23.39
(1,187)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	2	23.39
(1,287)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	2	23.38
(1,342)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:GLY:N	1:A:48:GLY:CA	1:A:48:GLY:C	5	23.36
(1,537)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	16	23.35
(1,507)	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	1:A:106:TYR:CD1	2	23.35
(1,608)	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	1:A:140:ALA:CA	1:A:140:ALA:C	5	23.34
(1,180)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	14	23.3
(1,426)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	4	23.29
(1,374)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	10	23.28
(1,287)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	15	23.28
(1,19)	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	4	23.28
(1,88)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	15	23.27
(1,516)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1	23.27
(1,620)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	18	23.26
(1,16)	1:A:19:ALA:N	1:A:19:ALA:CA	1:A:19:ALA:C	1:A:20:LEU:N	9	23.26
(1,78)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	13	23.24



Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,254)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	15	23.24
(1,246)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	18	23.24
(1,603)	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:CB	1:A:138:ASN:CG	1	23.23
(1,677)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	12	23.22
(1,626)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	4	23.22
(1,600)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1	23.2
(1,363)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	4	23.18
(1,263)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	2	23.18
(1,68)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:GLU:N	7	23.17
(1,363)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	3	23.14
(1,646)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	9	23.13
(1,613)	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:CB	1:A:141:GLU:CG	4	23.13
(1,663)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	20	23.11
(1,477)	1:A:93:PRO:N	1:A:93:PRO:CA	1:A:93:PRO:C	1:A:94:SER:N	5	23.09
(1,292)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	5	23.08
(1,236)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	18	23.07
(1,677)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	16	23.06
(1,342)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:GLY:N	1:A:48:GLY:CA	1:A:48:GLY:C	19	23.06
(1,336)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	3	23.06
(1,80)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	20	23.05
(1,654)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	15	23.03
(1,004) $(1,207)$	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	18	23.02
(1,207) $(1,310)$	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	5	23.01
(1,578)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	19	23.0
(1,578) $(1,520)$	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	4	23.0
(1,320) $(1,387)$	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	1:A:64:MET:SD	14	23.0
(1,638)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	6	22.99
(1,038) $(1,327)$	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	18	22.97
(1,327) $(1,236)$	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	1	22.96
(1,250) $(1,654)$	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	7	22.95
(1,054) $(1,257)$	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	17	22.95
(1,237) $(1,189)$	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:CB	1:A:5:CYS:SG	19	22.95
(1,189) $(1,483)$	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	1:A:96:LYS:CD	13	22.94
(1,483) $(1,390)$	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	18	22.93
(, ,	1:A:04:ME1:C	1:A:22:ILE:CA	1:A:05:SER.CA 1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	10	22.93
(1,250)			1:A:42:ILE:CB			22.92
(1,312)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB		1:A:42:ILE:CD1 1:A:89:THR:N	12	22.91
(1,80)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C		3	
(1,257)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	6	22.86
(1,582)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	18	22.85
(1,205)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	18	22.85
(1,380)	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	1:A:62:PHE:CD1	8	22.84
(1,575)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	19	22.83
(1,398)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	19	22.83
(1,263)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	7	22.83
(1,580)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	2	22.82
(1,520)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	5	22.8
(1,250)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	17	22.78
(1,388)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	18	22.77
(1,257)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	7	22.77
(1,484)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	16	22.76
(1,253)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	3	22.75



Key	$egin{array}{c} ed \ from \ previous \ pag \ \hline oldsymbol{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,521)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	13	22.73
(1,367)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	18	22.73
(1,460)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	2	22.72
(1,327)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	2	22.71
(1,677)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	2	22.7
(1,460)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	3	22.7
(1,336)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	4	22.7
(1,398)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	7	22.69
(1,518)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	7	22.68
(1,172)	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	14	22.68
(1,684)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	9	22.67
(1,367)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	4	22.64
(1,236)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	15	22.61
(1,670)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	8	22.6
(1,339)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	16	22.6
(1,681)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	12	22.59
(1,642)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	14	22.59
(1,275)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	11	22.58
(1,379)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	12	22.57
(1,327)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	8	22.57
(1,205)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	6	22.57
(1,638)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	8	22.56
(1,575)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	16	22.55
(1,543)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	7	22.55
(1,664)	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	1:A:154:MET:SD	14	22.54
(1,490)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	2	22.54
(1,660)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	2	22.53
(1,519)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	20	22.52
(1,251)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	12	22.52
(1,524)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	17	22.51
(1,524)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	10	22.49
(1,580)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1	22.47
(1,523)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	16	22.47
(1,473)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	8	22.47
(1,262)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	14	22.47
(1,252)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	17	22.47
(1,339)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	15	22.44
(1,426)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	6	22.42
(1,418)	1:A:73:PHE:C	1:A:74:GLY:N	1:A:74:GLY:CA	1:A:74:GLY:C	18	22.42
(1,534)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	17	22.41
(1,398)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	17	22.41
(1,305)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	13	22.41
(1,236)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	19	22.4
(1,590)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	12	22.39
(1,414)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	15	22.39
(1,385)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	8	22.38
(1,448)	1:A:83:GLY:C	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	10	22.32
(1,682)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	17	22.31
(1,339)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	13	22.31
(1,334)	1:A:45:LEU:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	2	22.3
(1,572)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	14	22.29
(1,0,2)	1.11.102.1110.11			1.11.132.1110.00		ed on nert nage



	ed from previous pag		A	A	3.6 1.1	T 7* 1 4* ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,418)	1:A:73:PHE:C	1:A:74:GLY:N	1:A:74:GLY:CA	1:A:74:GLY:C	2	22.29
(1,286)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	19	22.29
(1,362)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	2	22.28
(1,311)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	19	22.28
(1,257)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	9	22.28
(1,321)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	19	22.27
(1,524)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	12	22.26
(1,32)	1:A:27:ALA:N	1:A:27:ALA:CA	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	3	22.26
(1,383)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	11	22.24
(1,217)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	20	22.23
(1,446)	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	1:A:83:GLY:CA	1:A:83:GLY:C	6	22.21
(1,347)	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:CB	1:A:49:GLN:CG	16	22.18
(1,672)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	18	22.15
(1,451)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	6	22.15
(1,306)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	11	22.14
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	18	22.14
(1,18)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	1	22.14
(1,645)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	10	22.13
(1,521)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	6	22.12
(1,398)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	1	22.12
(1,524)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	8	22.11
(1,671)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	1	22.08
(1,378)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	14	22.08
(1,334)	1:A:45:LEU:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	3	22.06
(1,321)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	6	22.05
(1,258)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	14	22.05
(1,200)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	12	22.04
(1,595)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	9	22.03
(1,400)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	19	22.03
(1,418)	1:A:73:PHE:C	1:A:74:GLY:N	1:A:74:GLY:CA	1:A:74:GLY:C	19	22.02
(1,638)	1:A:146:GLN:C	1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:C	13	22.01
(1,519)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	13	22.01
(1,398)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	6	22.01
(1,628)	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	14	21.99
(1,620)	1:A:142:THR:N			1:A:142:THR:OG1	5	21.97
(1,236)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	7	21.96
(1,596)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	6	21.94
(1,394)	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	14	21.94
(1,387)	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	1:A:64:MET:SD	10	21.92
(1,653)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	5	21.87
(1,398)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	14	21.86
(1,330) $(1,280)$	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	13	21.86
(1,280) $(1,680)$	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	11	21.85
(1,356)	1:A:53:PRO:N	1:A:53:PRO:CA	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	13	21.85
(1,330) $(1,216)$	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	15	21.83
(1,210) $(1,80)$	1:A:11.LEU.N 1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	19	21.82
(1,620)	1:A:06:VAL:N 1:A:142:THR:N	1:A:08:VAL:CA 1:A:142:THR:CA	1:A:08:VAL:C 1:A:142:THR:CB	1:A:09:1HR:N 1:A:142:THR:OG1	15	21.82
` ' /	1:A:142:1 HK:N 1:A:109:ILE:N	1:A:142:THK:CA 1:A:109:ILE:CA	1:A:142:THK:CB 1:A:109:ILE:CB	1:A:142:11R:OG1 1:A:109:ILE:CG1	8	21.81
(1,516)					20	
(1,336)	1:A:46:LEU:CA 1:A:28:MET:CA	1:A:46:LEU:CB 1:A:28:MET:CB	1:A:46:LEU:CG 1:A:28:MET:CG	1:A:46:LEU:CD1 1:A:28:MET:SD	9	21.81 21.8
(1,267)				1:A:28:ME1:SD 1:A:2:ASP:C		
(1,169)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	T:A:Z:ASP:U	6	21.79



	ed from previous pag		A	A / A	3.6 1.1	T 7. 1 /)
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,156)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:C	1:A:150:ARG:N	12	21.79
(1,84)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	3	21.78
(1,68)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:GLU:N	20	21.76
(1,310)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	19	21.76
(1,221)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	2	21.76
(1,537)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	17	21.73
(1,519)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	1	21.71
(1,290)	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	1:A:35:PHE:CD1	14	21.7
(1,418)	1:A:73:PHE:C	1:A:74:GLY:N	1:A:74:GLY:CA	1:A:74:GLY:C	12	21.69
(1,173)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	14	21.69
(1,520)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	3	21.68
(1,520)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	16	21.68
(1,282)	1:A:31:LEU:C	1:A:32:GLY:N	1:A:32:GLY:CA	1:A:32:GLY:C	20	21.67
(1,646)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	7	21.66
(1,287)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	11	21.66
(1,682)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:CB	1:A:157:GLU:CG	18	21.64
(1,309)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	18	21.64
(1,167)	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	1:A:1:MET:SD	20	21.63
(1,620)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	6	21.62
(1,169)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	19	21.6
(1,645)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	15	21.58
(1,207)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	4	21.55
(1,459)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	12	21.54
(1,460)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	13	21.53
(1,671)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	15	21.52
(1,281)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	8	21.52
(1,391)	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	2	21.51
(1,72)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	19	21.5
(1,649)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	6	21.5
(1,496)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	10	21.5
(1,210)	1:A:9:CYS:C	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	3	21.48
(1,524)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	14	21.46
(1,332)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	17	21.46
(1,497)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	2	21.43
(1,321)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	18	21.43
(1,32)	1:A:27:ALA:N	1:A:27:ALA:CA	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1	21.43
(1,589)	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	6	21.42
(1,345)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:CA	1:A:49:GLN:C	17	21.42
(1,312)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	5	21.42
(1,524)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	5	21.41
(1,628)	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	16	21.4
(1,649)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	8	21.38
(1,626)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	9	21.38
(1,374)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	2	21.37
(1,339)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	8	21.37
(1,393) $(1,294)$	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:CB	1:A:36:GLU:CG	20	21.37
(1,243)	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	16	21.37
(1,263)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	8	21.34
(1,342)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:GLY:N	1:A:48:GLY:CA	1:A:48:GLY:C	2	21.33
(1,342) $(1,263)$	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	19	21.33
(1,258)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	3	21.33
(1,200)	1.11.20.GEIV.IV	1.11.20.0111.011	1.11.20.GLIV.OD	1.11.20.0111.00		21.55



	ed from previous pag		1 1 2		2.5	T 70 1 10 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,649)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	19	21.32
(1,484)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	17	21.32
(1,523)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	6	21.31
(1,312)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	16	21.28
(1,679)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	3	21.27
(1,520)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	10	21.27
(1,355)	1:A:52:SER:N	1:A:52:SER:CA	1:A:52:SER:C	1:A:53:PRO:N	8	21.25
(1,32)	1:A:27:ALA:N	1:A:27:ALA:CA	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	8	21.25
(1,262)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	19	21.25
(1,321)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	1	21.23
(1,628)	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	15	21.2
(1,686)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	4	21.18
(1,474)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	1	21.18
(1,537)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	19	21.17
(1,78)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	4	21.16
(1,516)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	20	21.16
(1,654)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	2	21.15
(1,342)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:GLY:N	1:A:48:GLY:CA	1:A:48:GLY:C	18	21.15
(1,72)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	8	21.13
(1,371)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	19	21.13
(1,252)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	13	21.13
(1,80)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	10	21.12
(1,654)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	14	21.11
(1,626)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	12	21.11
(1,480)	1:A:95:GLY:C	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	12	21.1
(1,651)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	8	21.08
(1,327)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	14	21.08
(1,540)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	2	21.06
(1,331)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	1	21.04
(1,524)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	3	21.02
(1,429)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	11	21.02
(1,355)	1:A:52:SER:N	1:A:52:SER:CA	1:A:52:SER:C	1:A:53:PRO:N	18	21.02
(1,223)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	2	21.02
(1,601)	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	15	21.01
(1,336)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	8	21.01
(1,257)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	1	21.01
(1,206)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	10	20.98
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	13	20.96
(1,12)	1:A:14:LEU:N	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:C	1:A:15:ALA:N	19	20.96
(1,419)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	6	20.94
(1,619)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	8	20.93
(1,516)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	6	20.93
(1,174)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	17	20.93
(1,506)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:CB	1:A:106:TYR:CG	9	20.92
(1,334)	1:A:45:LEU:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	11	20.92
(1,182)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:CB	1:A:4:GLU:CG	8	20.92
(1,627)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1	20.89
(1,398)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	2	20.89
(1,339)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	2	20.89
(1,199)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	10	20.89
				. —. —		



	ed from previous pag		A., 0		36 11	T 70 1 (0 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,84)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	7	20.86
(1,52)	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:C	1:A:52:SER:N	17	20.85
(1,426)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	12	20.84
(1,419)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	20	20.84
(1,654)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	10	20.81
(1,451)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	8	20.81
(1,257)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	8	20.81
(1,472)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	15	20.8
(1,257)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	3	20.77
(1,206)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	12	20.77
(1,16)	1:A:19:ALA:N	1:A:19:ALA:CA	1:A:19:ALA:C	1:A:20:LEU:N	4	20.77
(1,309)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	10	20.75
(1,419)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	17	20.74
(1,379)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	2	20.73
(1,525)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	11	20.71
(1,16)	1:A:19:ALA:N	1:A:19:ALA:CA	1:A:19:ALA:C	1:A:20:LEU:N	19	20.71
(1,459)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	5	20.7
(1,339)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	20	20.7
(1,672)	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	12	20.69
(1,517)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	18	20.69
(1,205)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	15	20.69
(1,16)	1:A:19:ALA:N	1:A:19:ALA:CA	1:A:19:ALA:C	1:A:20:LEU:N	18	20.69
(1,516)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	15	20.68
(1,418)	1:A:73:PHE:C	1:A:74:GLY:N	1:A:74:GLY:CA	1:A:74:GLY:C	13	20.65
(1,660)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	16	20.64
(1,649)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	3	20.64
(1,540)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	18	20.63
(1,517)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	11	20.63
(1,181)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	2	20.6
(1,516)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	14	20.57
(1,496)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	8	20.57
(1,486)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1	20.56
(1,426)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	16	20.56
(1,384)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	17	20.56
(1,185)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	9	20.55
(1,167)	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	1:A:1:MET:SD	7	20.55
(1,404)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	19	20.53
(1,379)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	13	20.49
(1,497)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	13	20.48
(1,419)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	5	20.47
(1,164)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1	20.47
(1,596)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	20	20.46
(1,307)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	17	20.43
(1,537) $(1,532)$	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	5	20.42
(1,355)	1:A:52:SER:N	1:A:52:SER:CA	1:A:52:SER:C	1:A:53:PRO:N	17	20.41
(1,228)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	8	20.38
(1,16)	1:A:19:ALA:N	1:A:19:ALA:CA	1:A:19:ALA:C	1:A:20:LEU:N	5	20.37
(1,501)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	12	20.36
(1,374)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	12	20.36
(1,173)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	12	20.35
(1,175) $(1,156)$	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:C	1:A:150:ARG:N	3	20.35
(1,100)	1.11.140.11110.1V	1.11.140.11110.OA	1.71.145.11116.0	1.71.100.71100.11		20.00



Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,603)	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:CB	1:A:138:ASN:CG	18	20.33
(1,684)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	17	20.32
(1,460)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	14	20.31
(1,400) $(1,595)$	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	16	20.31
(1,333) $(1,282)$	1:A:31:LEU:C	1:A:32:GLY:N	1:A:32:GLY:CA	1:A:32:GLY:C	19	20.3
(1,426)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	20	20.26
(1,420) $(1,296)$	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	18	20.25
(1,399)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	1	20.24
(1,333) $(1,312)$	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	2	20.24
(1,312) $(1,162)$	1:A:152:SER:N	1:A:152:SER:CA	1:A:152:SER:C	1:A:153:LEU:N	1	20.22
(1,102) $(1,243)$	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CD1	2	20.22
(1,243) $(1,678)$	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	4	20.19
(1,576) $(1,52)$	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:C	1:A:52:SER:N	7	20.19
(1,52) $(1,541)$	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	1:A:118:LYS:CD	4	20.19
(1,341) $(1,251)$	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	6	20.18
(1,231) $(1,477)$	1:A:93:PRO:N	1:A:93:PRO:CA	1:A:93:PRO:C	1:A:94:SER:N	13	20.17
· · /	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:95:FRO:C 1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	5	20.17
(1,451)	1:A:83:GLY:C	1:A:80:ARG:N 1:A:23:ARG:CA	1:A:80:ARG:CA 1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	10	20.14
(1,253)	1:A:146:GLN:C	1:A:25:ARG:CA 1:A:147:LEU:N	1:A:25:ARG:CB 1:A:147:LEU:CA	1:A:25:ARG:CG 1:A:147:LEU:C	3	20.11
(1,638)	1:A:140:GLN:C	1:A:147:LEU:N 1:A:103:ILE:CA	1:A:147:LEU:CA 1:A:103:ILE:CB	1:A:147:LEU:C 1:A:103:ILE:CG1	1	20.1
(1,496)						
(1,16)	1:A:19:ALA:N	1:A:19:ALA:CA 1:A:137:ASP:N	1:A:19:ALA:C 1:A:137:ASP:CA	1:A:20:LEU:N 1:A:137:ASP:C	14	20.09
(1,597)	1:A:136:LEU:C				4	20.07
(1,250)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	15	20.06
(1,339)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	19	20.02
(1,84)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	18	20.0
(1,621)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	15	20.0
(1,595)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	7	20.0
(1,282)	1:A:31:LEU:C	1:A:32:GLY:N	1:A:32:GLY:CA	1:A:32:GLY:C	8	20.0
(1,247)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	11	20.0
(1,211)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:CB	1:A:10:GLU:CG	10	19.98
(1,167)	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	1:A:1:MET:SD	2	19.96
(1,198)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	1	19.94
(1,571)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	8	19.93
(1,541)	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	1:A:118:LYS:CD	1	19.93
(1,334)	1:A:45:LEU:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	7	19.93
(1,297)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	6	19.93
(1,239)	1:A:18:PRO:N	1:A:18:PRO:CA	1:A:18:PRO:C	1:A:19:ALA:N	4	19.91
(1,667)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	18	19.9
(1,666)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	14	19.89
(1,263)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	10	19.88
(1,250)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	13	19.88
(1,426)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	3	19.87
(1,301)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	11	19.87
(1,331)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	7	19.85
(1,663)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	2	19.82
(1,275)	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:CB	1:A:30:GLU:CG	1	19.81
(1,314)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	3	19.79
(1,314)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	13	19.79
(1,16)	1:A:19:ALA:N	1:A:19:ALA:CA	1:A:19:ALA:C	1:A:20:LEU:N	12	19.79
(1,450)	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	1:A:85:GLY:CA	1:A:85:GLY:C	7	19.78
(1,72)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	10	19.77



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,519)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	8	19.74
(1,81)	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	15	19.72
(1,355)	1:A:52:SER:N	1:A:52:SER:CA	1:A:52:SER:C	1:A:53:PRO:N	4	19.71
(1,169)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	11	19.71
(1,459)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	14	19.69
(1,78)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	7	19.68
(1,444)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	4	19.66
(1,538)	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	1:A:117:MET:SD	18	19.65
(1,649)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	12	19.64
(1,180)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	9	19.64
(1,337)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	11	19.62
(1,228)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	16	19.62
(1,356)	1:A:53:PRO:N	1:A:53:PRO:CA	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	19	19.61
(1,660)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	17	19.6
(1,287)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	3	19.6
(1,321)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	9	19.59
(1,414)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	14	19.58
(1,263)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	11	19.58
(1,262)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	6	19.58
(1,578)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	15	19.57
(1,80)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	2	19.56
(1,394)	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	1	19.56
(1,355)	1:A:52:SER:N	1:A:52:SER:CA	1:A:52:SER:C	1:A:53:PRO:N	11	19.56
(1,312)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	11	19.56
(1,169)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	16	19.56
(1,537)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	8	19.54
(1,309)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	6	19.54
(1,282)	1:A:31:LEU:C	1:A:32:GLY:N	1:A:32:GLY:CA	1:A:32:GLY:C	1	19.53
(1,582)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	5	19.5
(1,446)	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	1:A:83:GLY:CA	1:A:83:GLY:C	2	19.49
(1,675)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	19	19.48
(1,649)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	17	19.47
(1,356)	1:A:53:PRO:N	1:A:53:PRO:CA	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	10	19.47
(1,250)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	4	19.46
(1,517)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	14	19.43
(1,496)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	5	19.4
(1,607)	1:A:139:PRO:N	1:A:139:PRO:CA	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	15	19.38
(1,477)	1:A:93:PRO:N	1:A:93:PRO:CA	1:A:93:PRO:C	1:A:94:SER:N	16	19.38
(1,314)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	18	19.38
(1,82)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	14	19.37
(1,516)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	11	19.37
(1,580)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	12	19.35
(1,519)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	16	19.35
(1,519)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	18	19.34
(1,301)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	20	19.33
(1,517)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	15	19.32
(1,334)	1:A:45:LEU:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	13	19.32
(1,516)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	18	19.31
(1,310) $(1,206)$	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	15	19.31
(1,260) $(1,460)$	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	5	19.3
(1,400) $(1,524)$	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	11	19.29
(1,024)	1.71.112. VAD.IV	1.11.112. VAL.OA	1.11.112. VAL.OD	1.71.112. VAL.OGI		19.29



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,388)	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	11	19.28
(1,645)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	13	19.27
(1,192)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	7	19.27
(1,84)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	5	19.26
(1,355)	1:A:52:SER:N	1:A:52:SER:CA	1:A:52:SER:C	1:A:53:PRO:N	20	19.26
(1,587)	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:CB	1:A:135:TYR:CG	1:A:135:TYR:CD1	18	19.25
(1,310)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	7	19.25
(1,398)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	18	19.24
(1,231)	1:A:16:PRO:N	1:A:16:PRO:CA	1:A:16:PRO:C	1:A:17:VAL:N	13	19.24
(1,172)	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	20	19.24
(1,30)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:ALA:N	1	19.23
(1,205)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	12	19.23
(1,306)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	12	19.22
(1,84)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	15	19.2
(1,393)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	17	19.2
(1,262)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	16	19.2
(1,653)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	10	19.19
(1,372)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	3	19.19
(1,319)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	1	19.19
(1,257)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	12	19.19
(1,600)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	10	19.18
(1,327)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	13	19.17
(1,164)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	4	19.17
(1,78)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	8	19.16
(1,321)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	5	19.16
(1,321) $(1,301)$	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	14	19.15
(, ,	1:A:44:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	15	19.13
(1,626)		1:A:144:PRO:CA 1:A:47:ALA:N	1:A:44:PRO:C 1:A:47:ALA:CA			
(1,339)	1:A:46:LEU:C			1:A:47:ALA:C	11	19.13
(1,626)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1	19.11
(1,80)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	6	19.1
(1,474)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	16	19.09
(1,306)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	13	19.09
(1,207)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	10	19.09
(1,384)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	6	19.08
(1,517)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	6	19.07
(1,339)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	17	19.07
(1,660)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	3	19.06
(1,409)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	10	19.05
(1,399)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	14	19.05
(1,626)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	20	19.04
(1,374)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	11	19.04
(1,337)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	12	19.02
(1,205)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	10	19.02
(1,246)	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:CB	1:A:21:LEU:CG	1:A:21:LEU:CD1	3	19.01
(1,582)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	12	18.99
(1,288)	1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	18	18.99
(1,523)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	3	18.98
(1,336)	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	16	18.98
(1,670)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	14	18.97
(1,52)	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:C	1:A:52:SER:N	10	18.96
(1,484)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	15	18.96
` ' /	1	1	1	1		ed on next page



Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,262)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	2	18.95
(1,407)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:CB	1:A:71:VAL:CG1	4	18.94
(1,314)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	10	18.92
(1,519)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	3	18.91
(1,653)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	14	18.89
(1,236)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	11	18.89
(1,198)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	3	18.89
(1,418)	1:A:73:PHE:C	1:A:74:GLY:N	1:A:74:GLY:CA	1:A:74:GLY:C	16	18.87
(1,251)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	13	18.87
(1,653)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	2	18.85
(1,498)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	10	18.85
(1,517)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	20	18.84
(1,663)	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	18	18.83
(1,78)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	11	18.82
(1,78)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	17	18.82
(1,173)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	19	18.79
(1,418)	1:A:73:PHE:C	1:A:74:GLY:N	1:A:74:GLY:CA	1:A:74:GLY:C	15	18.78
(1,52)	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:C	1:A:52:SER:N	15	18.77
(1,582)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	2	18.76
(1,450)	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	1:A:85:GLY:CA	1:A:85:GLY:C	4	18.76
(1,476)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	1:A:93:PRO:N	15	18.75
(1,429)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	3	18.75
(1,580)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	7	18.74
(1,524)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	6	18.69
(1,498)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	14	18.68
(1,282)	1:A:31:LEU:C	1:A:32:GLY:N	1:A:32:GLY:CA	1:A:32:GLY:C	17	18.68
(1,510)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	13	18.66
(1,78)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	20	18.64
(1,383)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	1	18.63
(1,627)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	9	18.62
(1,297)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	16	18.62
(1,651)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	9	18.59
(1,523)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	5	18.59
(1,311)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	5	18.58
(1,660)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	12	18.57
(1,543)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	1	18.57
(1,498)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	2	18.57
(1,482)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	12	18.56
(1,523)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	14	18.54
(1,191)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	18	18.54
(1,81)	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	5	18.53
(1,486)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	7	18.53
(1,250)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	3	18.53
(1,252)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	8	18.5
(1,580)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	18	18.49
(1,311)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	1	18.49
(1,355)	1:A:52:SER:N	1:A:52:SER:CA	1:A:52:SER:C	1:A:53:PRO:N	14	18.48
(1,200)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	9	18.48
(1,603)	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:CB	1:A:138:ASN:CG	8	18.47
(1,582)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	19	18.47
(1,459)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	13	18.47
(1,400)	1.11.01. VAL.IV	1.11.01. VAL.OA	1.11.01. VAL.OD	1.71.01. VAL.OG1		ed on nert nage



	ed from previous pag				36 11	T71 1 11
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,460)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	12	18.46
(1,269)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	18	18.45
(1,582)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	17	18.39
(1,496)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	7	18.38
(1,519)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	6	18.36
(1,498)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	4	18.36
(1,494)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	20	18.36
(1,583)	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CA	1:A:135:TYR:C	17	18.34
(1,528)	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	1:A:113:TYR:CD1	20	18.34
(1,306)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	19	18.33
(1,80)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	8	18.32
(1,582)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	7	18.32
(1,590)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	5	18.27
(1,504)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	14	18.25
(1,674)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	1	18.24
(1,309)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	19	18.24
(1,312)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	18	18.22
(1,82)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	15	18.21
(1,298)	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	1:A:39:TYR:CD1	1	18.2
(1,517)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	8	18.19
(1,207)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	8	18.19
(1,186)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	1	18.19
(1,312)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	15	18.18
(1,561)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	13	18.17
(1,398)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	3	18.17
(1,217)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	15	18.17
(1,426)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	14	18.16
(1,562)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	17	18.14
(1,654)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	5	18.13
(1,282)	1:A:31:LEU:C	1:A:32:GLY:N	1:A:32:GLY:CA	1:A:32:GLY:C	13	18.12
(1,621)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	12	18.11
(1,659)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	1	18.1
(1,164)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	7	18.1
(1,262)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	3	18.09
(1,394)	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	15	18.08
(1,312)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	7	18.07
(1,16)	1:A:19:ALA:N	1:A:19:ALA:CA	1:A:19:ALA:C	1:A:20:LEU:N	11	18.05
(1,313)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	20	18.04
(1,513) $(1,52)$	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:C	1:A:52:SER:N	8	18.02
(1,619)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	20	17.99
(1,019) $(1,334)$	1:A:45:LEU:C	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	5	17.98
(1,334) $(1,180)$	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	7	17.97
(1,180) $(1,680)$	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	19	17.96
(1,080) $(1,264)$	1:A:130:1115:C 1:A:27:ALA:C	1:A:137:GLU:N 1:A:28:MET:N	1:A:137:GLU:CA 1:A:28:MET:CA	1:A:137.GLU.C 1:A:28:MET:C	15	17.96
(1,204) $(1,336)$	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:CB	1:A:46:LEU:CG	1:A:46:LEU:CD1	19	17.95
(1,330) $(1,278)$	1:A:31:LEU:N	1:A:40:LEU:CB	1:A:40:LEU:CG 1:A:31:LEU:CB	1:A:40:LEU:CD1 1:A:31:LEU:CG	15	17.94
(1,278) $(1,594)$	1:A:31:LEU:N 1:A:136:LEU:CA	1:A:31:LEU:CA 1:A:136:LEU:CB	1:A:31:LEU:CB 1:A:136:LEU:CG	1:A:31:LEU:CG 1:A:136:LEU:CD1	8	17.94
(1,394) $(1,372)$	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	7	17.91
(1,372) $(1,32)$	1:A:00:ARG:N 1:A:27:ALA:N	1:A:00:ARG:CA 1:A:27:ALA:CA	1:A:00:ARG:CB	1:A:00:ARG:CG 1:A:28:MET:N	2	17.91
	1:A:27:ALA:N 1:A:147:LEU:CA	1:A:27:ALA:CA 1:A:147:LEU:CB	1:A:27:ALA:C 1:A:147:LEU:CG	1:A:28:ME1:N 1:A:147:LEU:CD1		17.91
(1,642)					4	
(1,523)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	8	17.89



	ed from previous pag		A	A	3.6 1.1	T 7* 1 (* /)
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,383)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	9	17.87
(1,418)	1:A:73:PHE:C	1:A:74:GLY:N	1:A:74:GLY:CA	1:A:74:GLY:C	6	17.86
(1,312)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	4	17.86
(1,228)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	9	17.86
(1,660)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	5	17.84
(1,342)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:GLY:N	1:A:48:GLY:CA	1:A:48:GLY:C	8	17.84
(1,78)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	3	17.83
(1,306)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	20	17.81
(1,608)	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	1:A:140:ALA:CA	1:A:140:ALA:C	8	17.8
(1,411)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:CB	1:A:72:GLU:CG	10	17.79
(1,403)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:CB	1:A:70:GLU:CG	10	17.79
(1,363)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	20	17.78
(1,391)	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	14	17.77
(1,398)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:CB	1:A:68:THR:OG1	8	17.76
(1,262)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	11	17.76
(1,523)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	12	17.74
(1,387)	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	1:A:64:MET:SD	19	17.73
(1,81)	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	6	17.72
(1,264)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	14	17.69
(1,185)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	14	17.69
(1,301)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	17	17.66
(1,164)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	20	17.66
(1,301)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	19	17.65
(1,686)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	14	17.63
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD1	4	17.63
(1,383)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	8	17.6
(1,262)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	8	17.59
(1,262)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	17	17.59
(1,206)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	13	17.59
(1,81)	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	19	17.58
(1,308)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	20	17.58
(1,321)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	4	17.56
(1,239)	1:A:18:PRO:N	1:A:18:PRO:CA	1:A:18:PRO:C	1:A:19:ALA:N	7	17.55
(1,321)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	14	17.54
(1,579)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1	17.53
(1,524)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	16	17.53
(1,251)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	17	17.53
(1,525)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	10	17.51
(1,68)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:GLU:N	1	17.5
(1,269)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	14	17.5
(1,523)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	17	17.49
(1,540)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	19	17.48
(1,252)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	12	17.48
(1,314)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	15	17.47
(1,282)	1:A:31:LEU:C	1:A:32:GLY:N	1:A:32:GLY:CA	1:A:32:GLY:C	9	17.47
(1,540)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:CB	1:A:118:LYS:CG	8	17.45
(1,82)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	16	17.43
(1,496)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	19	17.43
(1,206)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	6	17.43
\ / ~~/						
(1,363)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	15	17.42



Key	$egin{array}{c} ext{ed from previous pag} \ ext{ } ext{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,80)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	7	17.39
(1,50) $(1,519)$	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	7	17.32
(1,513) $(1,502)$	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	6	17.32
(1,902) $(1,278)$	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	11	17.32
(1,324)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	9	17.31
(1,324) $(1,250)$	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	16	17.31
(1,534)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	7	17.3
(1,459)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	3	17.3
(1,155) (1,459)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	2	17.28
(1,193) $(1,498)$	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	8	17.26
(1,450) $(1,262)$	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	5	17.26
(1,202) $(1,18)$	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	7	17.26
(1,582)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	9	17.22
(1,355)	1:A:52:SER:N	1:A:52:SER:CA	1:A:52:SER:C	1:A:53:PRO:N	15	17.22
(1,339) $(1,239)$	1:A:18:PRO:N	1:A:18:PRO:CA	1:A:18:PRO:C	1:A:19:ALA:N	11	17.21
(1,239) $(1,310)$	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	3	17.21
(1,310) $(1,282)$	1:A:31:LEU:C	1:A:32:GLY:N	1:A:32:GLY:CA	1:A:32:GLY:C	3	17.19
(1,282) $(1,581)$	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	18	17.15
(1,361) $(1,206)$	1:A:134:ILE:CA 1:A:8:VAL:N	1:A:134:ILE:CB 1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:134:ILE:CD1 1:A:8:VAL:CG1	18	17.15
(1,200) $(1,173)$	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	8	17.15
(1,650)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	7	17.14
(1,590)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	13	17.14
(1,312)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	20	17.14
(1,512) $(1,579)$	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	10	17.14
(1,379) $(1,471)$	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	12	17.11
(1,471) $(1,281)$	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	10	17.09
(1,362)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	13	17.08
(1,84)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	2	17.06
(1,653)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	7	17.05
(1,300)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	8	17.04
(1,300) $(1,207)$	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	14	17.03
(1,207) $(1,496)$	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	4	17.03
(1,490) $(1,674)$	1:A:105:ILE:N	1:A:105:ILE:CA 1:A:156:HIS:N	1:A:105:ILE:CB	1:A:156:HIS:C	10	17.02
· · /	1:A:65:SER:C	1:A:150:HIS:N 1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	9	17.01
(1,393)	1:A:05:SER:C 1:A:134:ILE:CA	1:A:00:ALA:N 1:A:134:ILE:CB		1:A:00:ALA:C 1:A:134:ILE:CD1	11	16.98
(1,582) $(1,653)$	1:A:154:1LE:CA 1:A:151:VAL:N	1:A:154:ILE:CB	1:A:154:ILE:CG1 1:A:151:VAL:CB	1:A:154:ILE:CD1 1:A:151:VAL:CG1	15	16.97
(1,033) $(1,321)$	1:A:43:LEU:C	1:A:131: VAL:CA 1:A:44:GLN:N	1:A:131:VAL:CB	1:A:131:VAL:CG1 1:A:44:GLN:C	13	16.97
(1,321) $(1,314)$	1:A:43:LEU:C 1:A:42:ILE:C	1:A:44:GLN:N 1:A:43:LEU:N	1:A:44:GLN:CA 1:A:43:LEU:CA	1:A:44:GLN:C 1:A:43:LEU:C	16	16.94
(1,314) $(1,198)$	1:A:42:ILE:C 1:A:6:GLN:C	1:A:45:LEU:N 1:A:7:PHE:N	1:A:45:LEU:CA 1:A:7:PHE:CA	1:A:45:LEU:C 1:A:7:PHE:C	2	16.93
(1,198) $(1,384)$	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	3	16.9
(1,534) $(1,534)$	1:A:05:GLY:C 1:A:116:LEU:CA	1:A:04:ME1:N 1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:04:ME1:C 1:A:116:LEU:CD1	10	16.88
(1,334) $(1,167)$	1:A:110:LEU:CA 1:A:1:MET:CA	1:A:110:LEU:CB 1:A:1:MET:CB	1:A:110:LEU:CG 1:A:1:MET:CG	1:A:110:LEU:CD1 1:A:1:MET:SD	14	16.87
(1,167) $(1,16)$	1:A:1:ME1:CA 1:A:19:ALA:N	1:A:19:ALA:CA	1:A:19:ALA:C	1:A:1:ME1:SD 1:A:20:LEU:N	10	16.87
(1,10) $(1,582)$	1:A:19:ALA:N 1:A:134:ILE:CA	1:A:19:ALA:CA 1:A:134:ILE:CB	1:A:19:ALA:C 1:A:134:ILE:CG1	1:A:20:LEU:N 1:A:134:ILE:CD1	3	16.86
(1,382) $(1,677)$	1:A:154:ILE:CA 1:A:156:HIS:N	1:A:154:ILE:CB 1:A:156:HIS:CA	1:A:154:ILE:CG1 1:A:156:HIS:CB	1:A:154:ILE:CD1 1:A:156:HIS:CG	10	16.85
(1,677) $(1,670)$	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	20	16.85
(1,070) $(1,270)$	1:A:135:LEU:CA 1:A:28:MET:C	1:A:193:LEU:CB 1:A:29:SER:N	1:A:195:LEU:CG 1:A:29:SER:CA	1:A:195:LEU:CD1 1:A:29:SER:C	16	16.85
(1,270) $(1,172)$	1:A:2:ME1:C 1:A:2:ASP:N	1:A:29:SER:N 1:A:2:ASP:CA	1:A:2:SER:CA 1:A:2:ASP:C	1:A:29:5ER:C 1:A:3:PHE:N	10	16.84
· · /	1:A:2:ASP:N 1:A:137:ASP:C	1:A:2:ASP:CA 1:A:138:ASN:N	1:A:2:ASP:C 1:A:138:ASN:CA	1:A:3:PHE:N 1:A:138:ASN:C		16.83
(1,601)					7	
(1,314)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	1	16.83
(1,434)	1:A:79:GLY:C	1:A:80:GLY:N	1:A:80:GLY:CA	1:A:80:GLY:C	17	16.79



$\begin{array}{c} \textbf{Violation} \ (\circ) \\ \hline 16.78 \\ \hline 16.78 \\ \hline 16.76 \\ \hline 16.75 \\ \hline 16.74 \\ \hline 16.73 \\ \hline 16.71 \\ \hline 16.7 \\ \hline 16.68 \\ \hline 16.68 \\ \hline 16.66 \\ \hline 16.65 \\ \hline 16.64 \\ \hline 16.62 \\ \hline 16.6 \\ \hline 16.58 \\ \hline 16.57 \\ \hline 16.56 \\ \hline 16.56 \\ \hline \end{array}$
16.78 16.76 16.75 16.74 16.73 16.71 16.7 16.7 16.68 16.68 16.66 16.65 16.64 16.62 16.6 16.65 16.66 16.58 16.57 16.56
16.76 16.75 16.74 16.73 16.71 16.7 16.7 16.68 16.68 16.66 16.65 16.64 16.62 16.6 16.65 16.66 16.58 16.57 16.56
16.75 16.74 16.73 16.71 16.7 16.7 16.68 16.68 16.66 16.65 16.64 16.62 16.6 16.66 16.58 16.57 16.56
16.74 16.73 16.71 16.7 16.7 16.68 16.68 16.66 16.65 16.64 16.62 16.6 16.6 16.6 16.5 16.5 16.5
16.73 16.71 16.7 16.68 16.68 16.66 16.66 16.65 16.64 16.62 16.6 16.6 16.6 16.5 16.5 16.5
16.71 16.7 16.8 16.68 16.66 16.65 16.65 16.64 16.62 16.6 16.6 16.58 16.57 16.56
16.7 16.68 16.68 16.66 16.65 16.64 16.62 16.6 16.6 16.58 16.57 16.56
16.7 16.68 16.68 16.66 16.65 16.64 16.62 16.6 16.6 16.58 16.57
16.68 16.68 16.66 16.65 16.64 16.62 16.6 16.6 16.58 16.57 16.56
16.68 16.66 16.65 16.64 16.62 16.6 16.6 16.58 16.57 16.56
16.66 16.65 16.64 16.62 16.6 16.6 16.58 16.57 16.56
16.66 16.65 16.64 16.62 16.6 16.6 16.58 16.57 16.56
16.65 16.64 16.62 16.6 16.6 16.58 16.57 16.56
16.64 16.62 16.6 16.6 16.58 16.57 16.56
16.62 16.6 16.6 16.58 16.57 16.56
16.6 16.6 16.58 16.57 16.56
16.6 16.58 16.57 16.56
16.58 16.57 16.56
16.57 16.56
16.56
16.56
10.00
16.55
16.53
16.53
16.51
16.51
16.51
16.5
16.49
16.49
16.46
16.44
16.43
16.42
16.41
16.39
16.39
16.38
16.38
16.37
16.37
16.34
16.33
16.33
16.32
$\frac{16.32}{16.25}$
16.25
16.25 16.25
16.25



	ed from previous pag		A 4 9	A + 4	N/L - 1 - 1	17:-1-4:
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,314)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	12	16.23
(1,80)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	4	16.22
(1,481)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	5	16.21
(1,660)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	6	16.18
(1,502)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	3	16.17
(1,172)	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1	16.16
(1,498)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	17	16.15
(1,312)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	13	16.15
(1,287)	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:CB	1:A:34:LEU:CG	1:A:34:LEU:CD1	5	16.14
(1,607)	1:A:139:PRO:N	1:A:139:PRO:CA	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	14	16.13
(1,572)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	15	16.11
(1,414)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	6	16.09
(1,81)	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	14	16.08
(1,302)	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	4	16.08
(1,269)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	7	16.07
(1,263)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	17	16.06
(1,674)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	7	16.05
(1,497)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	19	16.05
(1,282)	1:A:31:LEU:C	1:A:32:GLY:N	1:A:32:GLY:CA	1:A:32:GLY:C	2	16.05
(1,257)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	16	16.03
(1,677)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	3	16.02
(1,561)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	8	16.0
(1,314)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	6	16.0
(1,664)	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	1:A:154:MET:SD	8	15.99
(1,169)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	8	15.99
(1,496)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	14	15.97
(1,674)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	16	15.96
(1,459)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	7	15.96
(1,678)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	7	15.94
(1,649)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:CB	1:A:149:THR:OG1	13	15.93
(1,290)	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	1:A:35:PHE:CD1	16	15.92
(1,250) $(1,250)$	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	9	15.92
(1,391)	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	20	15.89
(1,327)	1:A:44:GLN:C	1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:C	10	15.89
(1,318)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	11	15.89
(1,310) $(1,252)$	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	7	15.89
(1,232) $(1,30)$	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:ALA:N	14	15.87
(1,88)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	10	15.86
(1,84)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:C	1:A:93:GL1:N 1:A:92:THR:N	14	15.86
(1,04) $(1,263)$	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:91:LEU:C 1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	20	15.85
(1,203) $(1,219)$	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:28:ME1:CA 1:A:11:LEU:CG	1:A:28:ME1:C 1:A:11:LEU:CD1	20	15.82
(1,219) $(1,459)$	1:A:11:LEU:CA 1:A:87:VAL:N	1:A:11:LEU:CB 1:A:87:VAL:CA	1:A:11:LEU:CG 1:A:87:VAL:CB	1:A:11:LEU:CD1 1:A:87:VAL:CG1	20	15.81
(1,459) $(1,363)$	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N		15.73
/	1:A:113:TYR:CA	1:A:33:GLY:CA 1:A:113:TYR:CB	1:A:55:GLY:C 1:A:113:TYR:CG	1:A:30:PRO:N 1:A:113:TYR:CD1	5 19	15.71
(1,528)	1:A:115:1 Y R:CA 1:A:155:LEU:C	1:A:113:1 Y R:CB 1:A:156:HIS:N	1:A:113:1 YR:CG 1:A:156:HIS:CA	1:A:113:1 Y R:CD1 1:A:156:HIS:C	3	15.71
(1,674)	1:A:155:LEU:C 1:A:64:MET:CA	1:A:150:HIS:N 1:A:64:MET:CB	1:A:150:HIS:CA 1:A:64:MET:CG	1:A:150:HIS:C 1:A:64:MET:SD	11	15.69
(1,387) $(1,310)$	1:A:04:ME1:CA 1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:04:ME1:CG 1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	11	15.67
,	1:A:42:1LE:N 1:A:3:PHE:C	1:A:42:ILE:CA 1:A:4:GLU:N	1:A:42:ILE:CB 1:A:4:GLU:CA	1:A:42:ILE:CG1 1:A:4:GLU:C	13	15.66
(1,180)	1:A:3:PHE:C 1:A:96:LYS:N		1:A:4:GLU:CA 1:A:96:LYS:CB		6	
(1,481)		1:A:96:LYS:CA		1:A:96:LYS:CG		15.65
(1,252)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	5	15.65
(1,215)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	10	15.63



Key	$egin{array}{c} ext{ed from previous pag} \ ext{ } ext{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,523)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	4	15.62
(1,419)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:CB	1:A:75:PHE:CG	2	15.62
(1,383)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	13	15.61
(1,598)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	9	15.6
(1,257)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	18	15.57
(1,78)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	14	15.56
(1,642)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	17	15.56
(1,72)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	5	15.55
(1,342)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:GLY:N	1:A:48:GLY:CA	1:A:48:GLY:C	9	15.54
(1,252)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	9	15.54
(1,68)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:GLU:N	6	15.53
(1,590)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	15	15.53
(1,582)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	20	15.52
(1,518)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	5	15.49
(1,312)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	14	15.49
(1,460)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	6	15.47
(1,476)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	1:A:93:PRO:N	11	15.46
(1,312)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	9	15.43
(1,414)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	11	15.42
(1,519)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	2	15.4
(1,620)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	12	15.37
(1,579)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	20	15.37
(1,390)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	10	15.32
(1,269)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	13	15.32
(1,502)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	18	15.31
(1,319)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	12	15.31
(1,82)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	9	15.29
(1,257)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	11	15.22
(1,310)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	15	15.21
(1,414)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	4	15.19
(1,356)	1:A:53:PRO:N	1:A:53:PRO:CA	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	9	15.19
(1,263)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	5	15.19
(1,206)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	1	15.19
(1,199)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	16	15.19
(1,356)	1:A:53:PRO:N	1:A:53:PRO:CA	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	1	15.17
(1,517)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	3	15.16
(1,569)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	14	15.15
(1,504)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	6	15.14
(1,623)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	5	15.12
(1,356)	1:A:53:PRO:N	1:A:53:PRO:CA	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	12	15.11
(1,594)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	12	15.1
(1,250)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	11	15.1
(1,524)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	7	15.07
(1,371)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	1	15.07
(1,671)	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:CB	1:A:155:LEU:CG	1:A:155:LEU:CD1	13	15.05
(1,162)	1:A:152:SER:N	1:A:152:SER:CA	1:A:152:SER:C	1:A:153:LEU:N	3	15.02
(1,185)	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	11	15.0
(1,223)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	15	14.98
(1,156)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:C	1:A:150:ARG:N	15	14.98
(1,590)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	10	14.91
(1,68)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:GLU:N	3	14.9



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,535)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	13	14.89
(1,356)	1:A:53:PRO:N	1:A:53:PRO:CA	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	20	14.89
(1,82)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	12	14.88
(1,596)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	5	14.83
(1,517)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	16	14.83
(1,625)	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	1:A:144:PRO:N	17	14.81
(1,264)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	5	14.81
(1,198)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	16	14.81
(1,282)	1:A:31:LEU:C	1:A:32:GLY:N	1:A:32:GLY:CA	1:A:32:GLY:C	12	14.79
(1,205)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	20	14.79
(1,167)	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	1:A:1:MET:SD	19	14.79
(1,228)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	3	14.78
(1,356)	1:A:53:PRO:N	1:A:53:PRO:CA	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	17	14.76
(1,180)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	20	14.76
(1,677)	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:CB	1:A:156:HIS:CG	9	14.75
(1,72)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	6	14.74
(1,311)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	3	14.74
(1,476)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	1:A:93:PRO:N	18	14.73
(1,494)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	17	14.72
(1,504)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	3	14.71
(1,497)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	16	14.7
(1,516)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	2	14.69
(1,477)	1:A:93:PRO:N	1:A:93:PRO:CA	1:A:93:PRO:C	1:A:94:SER:N	7	14.69
(1,318)	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:CB	1:A:43:LEU:CG	1:A:43:LEU:CD1	20	14.69
(1,156)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:C	1:A:150:ARG:N	16	14.69
(1,612)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	17	14.68
(1,389)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	10	14.68
(1,270)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	13	14.68
(1,597)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	7	14.67
(1,561)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	10	14.64
(1,471)	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:CB	1:A:91:LEU:CG	1:A:91:LEU:CD1	17	14.63
(1,494)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	9	14.62
(1,393)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	18	14.62
(1,18)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	3	14.62
(1,81)	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	16	14.61
(1,156)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:C	1:A:150:ARG:N	6	14.6
(1,16)	1:A:19:ALA:N	1:A:19:ALA:CA	1:A:19:ALA:C	1:A:20:LEU:N	17	14.55
(1,16)	1:A:19:ALA:N	1:A:19:ALA:CA	1:A:19:ALA:C	1:A:20:LEU:N	20	14.51
(1,459)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	17	14.49
(1,374)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	17	14.49
(1,156)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:C	1:A:150:ARG:N	7	14.49
(1,321)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	15	14.48
(1,591)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	15	14.47
(1,517)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	12	14.47
(1,190)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	7	14.43
(1,597)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	9	14.4
(1,653)	1:A:150:EEC:C	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	11	14.38
(1,083) $(1,282)$	1:A:31:LEU:C	1:A:32:GLY:N	1:A:32:GLY:CA	1:A:32:GLY:C	15	14.38
(1,162)	1:A:152:SER:N	1:A:152:SER:CA	1:A:152:SER:C	1:A:153:LEU:N	16	14.38
(1,102) $(1,305)$	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	20	14.37
(1,623)	1:A:142:THR:C	1:A:41:A5F:CA 1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	20	14.36
(1,023)	1.A.142.11III.U	1.A.145:ALA:N	1.A.145.ALA.UA	1.A.145.ALA.U		14.50



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,518)	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	1:A:109:ILE:CD1	4	14.36
(1,675)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	3	14.3
(1,380)	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:CB	1:A:62:PHE:CG	1:A:62:PHE:CD1	19	14.24
(1,228)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	5	14.23
(1,30)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:ALA:N	4	14.22
(1,459)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	10	14.19
(1,262)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	13	14.19
(1,306)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	5	14.12
(1,355)	1:A:52:SER:N	1:A:52:SER:CA	1:A:52:SER:C	1:A:53:PRO:N	10	14.09
(1,18)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	15	14.09
(1,523)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	13	14.06
(1,675)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	16	14.04
(1,524)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	19	14.03
(1,664)	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	1:A:154:MET:SD	9	14.02
(1,517)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	13	14.02
(1,156)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:C	1:A:150:ARG:N	5	14.02
(1,72)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	4	14.01
(1,230)	1:A:15:ALA:N	1:A:15:ALA:CA	1:A:15:ALA:C	1:A:16:PRO:N	8	14.01
(1,170)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	8	14.01
(1,315)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	6	14.0
(1,579)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	5	13.98
(1,363)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	8	13.98
(1,561)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	14	13.96
(1,628)	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	18	13.95
(1,517)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	19	13.94
(1,481)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	7	13.94
(1,270)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	7	13.93
(1,80)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	9	13.9
(1,52)	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:C	1:A:52:SER:N	9	13.9
(1,376)	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	1:A:61:TYR:CD1	18	13.87
(1,230)	1:A:15:ALA:N	1:A:15:ALA:CA	1:A:15:ALA:C	1:A:16:PRO:N	10	13.87
(1,78)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	5	13.84
(1,561)	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1:A:127:LEU:CD1	19	13.82
(1,679)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	13	13.81
(1,257)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	14	13.81
(1,620)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	1	13.8
(1,459)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	18	13.79
(1,331)	1:A:45:LEU:CA	1:A:45:LEU:CB	1:A:45:LEU:CG	1:A:45:LEU:CD1	15	13.79
(1,84)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	9	13.77
(1,200)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	15	13.77
(1,282)	1:A:31:LEU:C	1:A:32:GLY:N	1:A:32:GLY:CA	1:A:32:GLY:C	6	13.75
(1,264)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	16	13.75
(1,72)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	20	13.74
(1,494)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	16	13.74
(1,204)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	1:A:8:VAL:N	1	13.74
(1,653)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	20	13.72
(1,263)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	3	13.71
(1,596)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	18	13.69
(1,645)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:CB	1:A:148:ARG:CG	11	13.68
(1,043) $(1,297)$	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	2	13.68
(1,205)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	11	13.68
(1,200)	1.71.0. 7/11/.11	1.11.0. VIII.OII	1.71.0. 7711.01	1.11.0. VIII.OGI		13.00



	$\frac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom 1	Model	Violation (o)
(1.507)				Atom-4		, ,
(1,597)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	14	13.67
(1,18)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	12	13.66
(1,524)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	18	13.65
(1,496)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	2	13.63
(1,207)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	15	13.63
(1,205)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	7	13.62
(1,580)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	4	13.6
(1,215)	1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:CA	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	8	13.6
(1,356)	1:A:53:PRO:N	1:A:53:PRO:CA	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	15	13.59
(1,84)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	4	13.56
(1,32)	1:A:27:ALA:N	1:A:27:ALA:CA	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	20	13.54
(1,207)	1:A:9:CYS:N	1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB	1:A:9:CYS:SG	5	13.54
(1,310)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	14	13.52
(1,497)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	12	13.49
(1,263)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	9	13.48
(1,186)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	11	13.45
(1,625)	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	1:A:144:PRO:N	16	13.44
(1,609)	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	1:A:140:ALA:CA	1:A:140:ALA:C	6	13.43
(1,606)	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	1:A:139:PRO:N	11	13.41
(1,680)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	16	13.4
(1,387)	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	1:A:64:MET:SD	6	13.4
(1,608)	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	1:A:140:ALA:CA	1:A:140:ALA:C	3	13.38
(1,253)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:CB	1:A:23:ARG:CG	7	13.38
(1,32)	1:A:27:ALA:N	1:A:27:ALA:CA	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	18	13.35
(1,418)	1:A:73:PHE:C	1:A:74:GLY:N	1:A:74:GLY:CA	1:A:74:GLY:C	1	13.34
(1,206)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	17	13.34
(1,249)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	2	13.33
(1,52)	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:C	1:A:52:SER:N	1	13.32
(1,290)	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	1:A:35:PHE:CD1	11	13.32
(1,572)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	20	13.29
(1,32)	1:A:27:ALA:N	1:A:27:ALA:CA	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	9	13.28
(1,594)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	13	13.26
(1,361) $(1,262)$	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:CB	1:A:26:THR:OG1	9	13.21
(1,78)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	9	13.2
(1,581)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	15	13.19
(1,301) $(1,205)$	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	16	13.19
(1,209) $(1,459)$	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	9	13.17
(1,315)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	1	13.17
(1,319) $(1,269)$	1:A:28:MET:C	1:A:49:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	16	13.15
(1,209) $(1,78)$	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	15	13.14
(1,13) $(1,414)$	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	18	13.14
(1,414) $(1,572)$	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:73:F1E:CB 1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	13	13.13
(1,372) $(1,488)$	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG	1:A:101:LEU:CD1	18	13.11
(1,488) $(1,250)$	1:A:101:LEU:CA 1:A:22:ILE:N	1:A:101:LEU:CB	1:A:101:LEU:CG 1:A:22:ILE:CB	1:A:101:LEU:CD1 1:A:22:ILE:CG1	14	13.11
(1,230) $(1,383)$	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	3	13.11
· /	1:A:03:GLY:C 1:A:109:ILE:N	1:A:04:ME1:N 1:A:109:ILE:CA	1:A:04:ME1:CA 1:A:109:ILE:CB	1:A:04:ME1:C 1:A:109:ILE:CG1	10	13.09
(1,517)	1:A:65:SER:C	1:A:109:1LE:CA 1:A:66:ALA:N	1:A:109:1LE:CB 1:A:66:ALA:CA	1:A:109:ILE:CG1 1:A:66:ALA:C	2	13.09
(1,393)		1:A:6:GLN:CA	1:A:60:ALA:CA 1:A:6:GLN:C	1:A:00:ALA:C 1:A:7:PHE:N		
(1,197)	1:A:6:GLN:N				10	13.08
(1,517)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	9	13.07
(1,524)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	20	13.06
(1,660)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	15	13.03



	ed from previous pag				36 11	T70 1 .0 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,527)	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	9	12.98
(1,81)	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	20	12.96
(1,409)	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	18	12.95
(1,88)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	13	12.94
(1,496)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	3	12.94
(1,205)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	19	12.92
(1,310)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	2	12.87
(1,156)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:C	1:A:150:ARG:N	1	12.87
(1,72)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	9	12.86
(1,444)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	13	12.86
(1,250)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	19	12.85
(1,174)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	8	12.85
(1,72)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	12	12.83
(1,625)	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	1:A:144:PRO:N	12	12.83
(1,426)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	9	12.79
(1,664)	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:CB	1:A:154:MET:CG	1:A:154:MET:SD	13	12.77
(1,314)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	14	12.77
(1,281)	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CD1	19	12.75
(1,297)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:CB	1:A:39:TYR:CG	7	12.74
(1,653)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	13	12.72
(1,309)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1	12.72
(1,206)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	8	12.7
(1,391)	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	17	12.68
(1,582)	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	1:A:134:ILE:CD1	16	12.63
(1,314)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	5	12.5
(1,270)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	14	12.5
(1,248)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	18	12.48
(1,162)	1:A:152:SER:N	1:A:152:SER:CA	1:A:152:SER:C	1:A:153:LEU:N	4	12.45
(1,524)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	1	12.44
(1,186)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	17	12.42
(1,249)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	5	12.39
(1,685)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	14	12.37
(1,517)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	7	12.37
(1,339)	1:A:46:LEU:C	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	6	12.36
(1,249)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1	12.33
(1,263)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	14	12.31
(1,205)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	5	12.29
(1,167)	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:CB	1:A:1:MET:CG	1:A:1:MET:SD	6	12.28
(1,356)	1:A:53:PRO:N	1:A:53:PRO:CA	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	11	12.25
(1,82)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	11	12.22
(1,465)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	15	12.22
(1,249)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	8	12.22
(1,600)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	3	12.21
(1,609)	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	1:A:140:ALA:CA	1:A:140:ALA:C	8	12.2
(1,607)	1:A:139:PRO:N	1:A:139:PRO:CA	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	5	12.2
(1,643)	1:A:147:LEU:CA	1:A:147:LEU:CB	1:A:147:LEU:CG	1:A:147:LEU:CD1	13	12.19
(1,307)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	20	12.19
(1,418)	1:A:73:PHE:C	1:A:74:GLY:N	1:A:74:GLY:CA	1:A:74:GLY:C	10	12.14
(1,463)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	13	12.13
(1,459)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	8	12.12
(1,463)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	9	12.1
(1,100)	1.11.00.11110.11	1.11.00.11110.011	1.1.1.00.11116.0D			ad an next need



	ed from previous pag		A 4	A 1	N.C. 1.1	T 7* . 1 . 4*
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,190)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	16	12.08
(1,463)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	11	12.06
(1,362)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	12	12.06
(1,653)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	9	12.05
(1,679)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	19	12.04
(1,263)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	15	12.04
(1,474)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	20	12.03
(1,399)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	9	12.02
(1,626)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	8	12.01
(1,653)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	1	11.95
(1,179)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	12	11.94
(1,72)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	11	11.91
(1,653)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	8	11.9
(1,355)	1:A:52:SER:N	1:A:52:SER:CA	1:A:52:SER:C	1:A:53:PRO:N	19	11.89
(1,444)	1:A:82:GLU:N	1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	7	11.85
(1,571)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:CB	1:A:132:TYR:CG	19	11.83
(1,321)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	2	11.82
(1,465)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	16	11.81
(1,187)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	1	11.81
(1,650)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:CB	1:A:150:ARG:CG	16	11.78
(1,321)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	11	11.78
(1,162)	1:A:152:SER:N	1:A:152:SER:CA	1:A:152:SER:C	1:A:153:LEU:N	14	11.78
(1,534)	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:CB	1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:CD1	14	11.77
(1,675)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	1	11.76
(1,82)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	4	11.75
(1,321)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	10	11.73
(1,72)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	18	11.72
(1,658)	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:CB	1:A:153:LEU:CG	1:A:153:LEU:CD1	11	11.7
(1,278)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:CB	1:A:31:LEU:CG	4	11.68
(1,545)	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:CB	1:A:120:VAL:CG1	20	11.67
(1,626)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	10	11.65
(1,569)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:CB	1:A:130:GLU:CG	19	11.63
(1,312)	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:CD1	10	11.58
(1,309)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	9	11.58
(1,391)	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	11	11.56
(1,170)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	15	11.56
(1,270)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	18	11.55
(1,606)	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	1:A:139:PRO:N	20	11.54
(1,580)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	11	11.54
(1,82)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	5	11.53
(1,192)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	18	11.46
(1,205)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	2	11.44
(1,324)	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:CB	1:A:44:GLN:CG	3	11.42
(1,538)	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:CB	1:A:117:MET:CG	1:A:117:MET:SD	17	11.41
(1,282)	1:A:31:LEU:C	1:A:32:GLY:N	1:A:32:GLY:CA	1:A:32:GLY:C	4	11.38
(1,606)	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	1:A:139:PRO:N	7	11.36
(1,248)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	12	11.35
(1,653)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	18	11.34
(1,511)	1:A:107:GLY:C	1:A:108:GLU:N	1:A:108:GLU:CA	1:A:108:GLU:C	13	11.34
(1,653)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	12	11.32
· · /		1:A:25:GLN:CA		1:A:25:GLN:CG	6	
(1,258)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	_	11.32



	ed from previous pag		A	A	3.6 1.1	T 7* 1 4* ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,164)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	17	11.32
(1,625)	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	1:A:144:PRO:N	13	11.3
(1,363)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	7	11.3
(1,228)	1:A:14:LEU:CA	1:A:14:LEU:CB	1:A:14:LEU:CG	1:A:14:LEU:CD1	14	11.3
(1,315)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	7	11.29
(1,545)	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:CB	1:A:120:VAL:CG1	17	11.23
(1,321)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	20	11.23
(1,401)	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	1:A:69:PHE:CD1	6	11.22
(1,162)	1:A:152:SER:N	1:A:152:SER:CA	1:A:152:SER:C	1:A:153:LEU:N	10	11.22
(1,563)	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	1:A:128:SER:CA	1:A:128:SER:C	5	11.21
(1,545)	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:CB	1:A:120:VAL:CG1	12	11.21
(1,174)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	19	11.21
(1,449)	1:A:84:SER:N	1:A:84:SER:CA	1:A:84:SER:C	1:A:85:GLY:N	13	11.2
(1,620)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	2	11.18
(1,367)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	17	11.18
(1,626)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	2	11.15
(1,502)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	7	11.15
(1,234)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	9	11.14
(1,620)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	10	11.13
(1,162)	1:A:152:SER:N	1:A:152:SER:CA	1:A:152:SER:C	1:A:153:LEU:N	13	11.13
(1,496)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	15	11.12
(1,235)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	11	11.11
(1,199)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	3	11.11
(1,474)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	19	11.09
(1,387)	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	1:A:64:MET:SD	5	11.08
(1,621)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	13	11.06
(1,626)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	16	11.05
(1,579)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	16	11.05
(1,258)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:CB	1:A:25:GLN:CG	5	10.99
(1,156)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:C	1:A:150:ARG:N	4	10.99
(1,465)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	14	10.96
(1,16)	1:A:19:ALA:N	1:A:19:ALA:CA	1:A:19:ALA:C	1:A:20:LEU:N	13	10.96
(1,234)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	3	10.95
(1,545)	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:CB	1:A:120:VAL:CG1	5	10.92
(1,383)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	6	10.92
(1,545)	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:CB	1:A:120:VAL:CG1	4	10.82
(1,78)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	18	10.79
(1,307)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	12	10.78
(1,234)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	2	10.74
(1,234)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	16	10.73
(1,191)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	7	10.73
(1,474)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	10	10.72
(1,230)	1:A:15:ALA:N	1:A:15:ALA:CA	1:A:15:ALA:C	1:A:16:PRO:N	12	10.72
(1,16)	1:A:19:ALA:N	1:A:19:ALA:CA	1:A:19:ALA:C	1:A:20:LEU:N	8	10.69
(1,234)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	20	10.68
(1,545)	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:CB	1:A:120:VAL:CG1	9	10.66
(1,504)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	10	10.66
(1,504)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	13	10.66
(1,491)	1:A:102:TYR:N	1:A:102:TYR:CA	1:A:102:TYR:CB	1:A:102:TYR:CG	6	10.65
(1,621)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	19	10.59
(1,465)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	4	10.56
(-,-00)	1.11.00.11110.11		B			ad an mant maga



	ed from previous pag		A / 0	A	3.6 1.1	T 7* 1 (* ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,626)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	18	10.54
(1,674)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	19	10.52
(1,355)	1:A:52:SER:N	1:A:52:SER:CA	1:A:52:SER:C	1:A:53:PRO:N	12	10.52
(1,249)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	20	10.51
(1,52)	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:C	1:A:52:SER:N	6	10.48
(1,653)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	6	10.47
(1,545)	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:CB	1:A:120:VAL:CG1	10	10.46
(1,321)	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CA	1:A:44:GLN:C	8	10.45
(1,234)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	13	10.45
(1,679)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	17	10.44
(1,170)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	16	10.44
(1,264)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	11	10.42
(1,309)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	17	10.4
(1,517)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	17	10.39
(1,477)	1:A:93:PRO:N	1:A:93:PRO:CA	1:A:93:PRO:C	1:A:94:SER:N	18	10.37
(1,620)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	7	10.36
(1,181)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	9	10.36
(1,190)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	10	10.33
(1,545)	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:CB	1:A:120:VAL:CG1	2	10.31
(1,580)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	8	10.29
(1,170)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	11	10.29
(1,355)	1:A:52:SER:N	1:A:52:SER:CA	1:A:52:SER:C	1:A:53:PRO:N	16	10.26
(1,205)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	3	10.21
(1,546)	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:CB	1:A:120:VAL:CG1	1	10.2
(1,200)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	11	10.2
(1,395)	1:A:66:ALA:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	3	10.19
(1,56)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ALA:N	3	10.18
(1,205)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	9	10.14
(1,78)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	6	10.12
(1,264)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	10	10.12
(1,666)	1:A:154:MET:C	1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:CA	1:A:155:LEU:C	18	10.1
(1,653)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	17	10.08
(1,199)	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	1	10.06
(1,84)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	20	10.05
(1,162)	1:A:152:SER:N	1:A:152:SER:CA	1:A:152:SER:C	1:A:153:LEU:N	12	10.04
(1,88)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	1	10.02
(1,504)	1:A:105:PRO:N	1:A:105:PRO:CA	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	2	10.02
(1,596)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	7	10.0
(1,32)	1:A:27:ALA:N	1:A:27:ALA:CA	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	12	9.96
(1,355)	1:A:52:SER:N	1:A:52:SER:CA	1:A:52:SER:C	1:A:53:PRO:N	1	9.95
(1,267)	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:CB	1:A:28:MET:CG	1:A:28:MET:SD	5	9.94
(1,598)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	4	9.93
(1,625)	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	1:A:144:PRO:N	19	9.92
(1,546)	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:CB	1:A:120:VAL:CG1	13	9.86
(1,356)	1:A:53:PRO:N	1:A:53:PRO:CA	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	18	9.83
(1,314)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	4	9.83
(1,418)	1:A:73:PHE:C	1:A:74:GLY:N	1:A:74:GLY:CA	1:A:74:GLY:C	8	9.74
(1,78)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	2	9.72
(1,387)	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	1:A:64:MET:SD	3	9.69
(1,371)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	4	9.68
(1,257)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:OG1	20	9.65
(1,201)	1.11.2 1. 11110.11	121.11110.011	1.1.1.21.11110.01	121.11110.001		od on nort nago



Key	$rac{d\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,174)	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	12	9.65
(1,446)	1:A:82:GLU:C	1:A:83:GLY:N	1:A:83:GLY:CA	1:A:83:GLY:C	18	9.63
(1,234)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	17	9.63
(1,575)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:CB	1:A:133:GLU:CG	7	9.62
(1,653)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	19	9.61
(1,387)	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	1:A:64:MET:SD	15	9.61
(1,306)	1:A:41:ASP:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	17	9.57
(1,390)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	2	9.52
(1,363)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	6	9.52
(1,355)	1:A:52:SER:N	1:A:52:SER:CA	1:A:52:SER:C	1:A:53:PRO:N	5	9.5
(1,383) $(1,383)$	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	17	9.44
(1,68)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:GLU:N	2	9.42
(1,597)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	17	9.42
(1,387) $(1,180)$	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	2	9.42
(1,130) $(1,414)$	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	7	9.38
(1,414) $(1,80)$	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	5	9.36
· · /	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	4	9.36
(1,517)	1:A:51:LYS:N	1:A:109:1LE:CA 1:A:51:LYS:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1 1:A:52:SER:N	19	9.3
(1,52)	1:A:31:L15:N 1:A:120:VAL:N	1:A:31:L15:CA 1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:CB	1:A:32:SER:N 1:A:120:VAL:CG1	11	9.28
(1,545)		1:A:74:GLY:N	1:A:74:GLY:CA	1:A:74:GLY:C	14	9.28
(1,418)	1:A:73:PHE:C 1:A:89:THR:N	1:A:74:GLY:N 1:A:89:THR:CA	1:A:74:GLY:CA 1:A:89:THR:C	1:A:74:GLY:C 1:A:90:GLY:N	13	9.25
(1,82)		1:A:89:1HR:CA 1:A:104:GLY:CA	1:A:89:1HK:C 1:A:104:GLY:C	1:A:90:GLY:N 1:A:105:PRO:N		9.25
(1,502)	1:A:104:GLY:N				1	
(1,685)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	2	9.19
(1,81)	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	17	9.17
(1,168)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	20	9.17
(1,18)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	5	9.16
(1,162)	1:A:152:SER:N	1:A:152:SER:CA	1:A:152:SER:C	1:A:153:LEU:N	20	9.15
(1,414)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:CB	1:A:73:PHE:CG	12	9.14
(1,459)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	15	9.11
(1,156)	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:C	1:A:150:ARG:N	20	9.04
(1,619)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	13	8.99
(1,496)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	13	8.97
(1,30)	1:A:26:THR:N	1:A:26:THR:CA	1:A:26:THR:C	1:A:27:ALA:N	9	8.9
(1,19)	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	5	8.88
(1,32)	1:A:27:ALA:N	1:A:27:ALA:CA	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	14	8.87
(1,68)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:GLU:N	13	8.85
(1,545)	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:CB	1:A:120:VAL:CG1	15	8.85
(1,629)	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	15	8.8
(1,481)	1:A:96:LYS:N	1:A:96:LYS:CA	1:A:96:LYS:CB	1:A:96:LYS:CG	10	8.78
(1,221)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:CB	1:A:12:LYS:CG	12	8.78
(1,164)	1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CA	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	14	8.78
(1,686)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	1	8.76
(1,679)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	12	8.74
(1,680)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	3	8.73
(1,653)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	16	8.66
(1,626)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	14	8.66
(1,290)	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	1:A:35:PHE:CD1	17	8.63
(1,629)	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	16	8.6
(1,502)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	10	8.58
_ ` / /						
(1,82) (1,355)	1:A:89:THR:N 1:A:52:SER:N	1:A:89:THR:CA 1:A:52:SER:CA	1:A:89:THR:C 1:A:52:SER:C	1:A:90:GLY:N 1:A:53:PRO:N	3	8.54



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,528)	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:CB	1:A:113:TYR:CG	1:A:113:TYR:CD1	7	8.45
(1,600)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	6	8.43
(1,626)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	7	8.41
(1,170)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	19	8.4
(1,136)	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	1:A:125:PHE:N	20	8.38
(1,660)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	18	8.37
(1,545)	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:CB	1:A:120:VAL:CG1	19	8.21
(1,170)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	6	8.21
(1,84)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	1	8.2
(1,363)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	17	8.05
(1,660)	1:A:153:LEU:C	1:A:154:MET:N	1:A:154:MET:CA	1:A:154:MET:C	11	8.04
(1,235)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	7	8.04
(1,72)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	13	7.97
(1,82)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	20	7.95
(1,18)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	8	7.95
(1,81)	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	10	7.92
(1,545)	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:CB	1:A:120:VAL:CG1	6	7.85
(1,172)	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	6	7.85
(1,52)	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:C	1:A:52:SER:N	4	7.81
(1,84)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	11	7.79
(1,384)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:MET:N	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:C	11	7.76
(1,84)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	16	7.75
(1,546)	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:CB	1:A:120:VAL:CG1	7	7.71
(1,249)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	7	7.66
(1,235)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	19	7.6
(1,170)	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	2	7.59
(1,459)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	19	7.51
(1,16)	1:A:19:ALA:N	1:A:19:ALA:CA	1:A:19:ALA:C	1:A:20:LEU:N	15	7.51
(1,600)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	5	7.49
(1,590)	1:A:135:TYR:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	17	7.49
(1,68)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:GLU:N	10	7.48
(1,273)	1:A:29:SER:C	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:C	1	7.41
(1,235)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	15	7.39
(1,477)	1:A:93:PRO:N	1:A:93:PRO:CA	1:A:93:PRO:C	1:A:94:SER:N	9	7.37
(1,498)	1:A:103:ILE:CA		1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	20	7.34
(1,80)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	16	7.31
(1,625)	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	1:A:144:PRO:N	4	7.28
(1,355)	1:A:52:SER:N	1:A:52:SER:CA	1:A:52:SER:C	1:A:53:PRO:N	9	7.24
(1,543)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:CB	1:A:119:TRP:CG	8	7.22
(1,205)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:CB	1:A:8:VAL:CG1	14	7.18
(1,264)	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	1:A:28:MET:CA	1:A:28:MET:C	7	7.17
(1,204) $(1,200)$	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:CB	1:A:7:PHE:CG	17	7.07
(1,235)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	1	7.04
(1,235) $(1,545)$	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:CB	1:A:120:VAL:CG1	14	7.04
(1,343) $(1,217)$	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	17	7.02
(1,217) $(1,625)$	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	1:A:144:PRO:N	9	7.02
(1,023) $(1,401)$	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:CB	1:A:69:PHE:CG	1:A:69:PHE:CD1	12	7.01
(1,401) $(1,230)$	1:A:15:ALA:N	1:A:09:F11E:CB	1:A:09:F1E:CG 1:A:15:ALA:C	1:A:09:FHE.CD1 1:A:16:PRO:N	5	7.0
(1,230) $(1,498)$	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:10:PKO:N 1:A:103:ILE:CD1	18	6.98
(1,498) $(1,607)$	1:A:103:ILE.CA 1:A:139:PRO:N	1:A:103:ILE.CB 1:A:139:PRO:CA	1:A:103:ILE:CG1 1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	12	6.97
(1,007) $(1,156)$	1:A:139:PRO:N 1:A:149:THR:N	1:A:139:PRO:CA 1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:C	1:A:140:ALA:N 1:A:150:ARG:N	14	6.97
(1,100)	1.A.149.1 fln:IV	1.A.149.111N:UA	1.A.149:1 IIN:U	1.A.100:ANG:N		0.97



	ed from previous pag		A., 0		3.6.1.1	T 71 1 11 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,82)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	8	6.96
(1,16)	1:A:19:ALA:N	1:A:19:ALA:CA	1:A:19:ALA:C	1:A:20:LEU:N	2	6.96
(1,653)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	4	6.95
(1,235)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	18	6.93
(1,356)	1:A:53:PRO:N	1:A:53:PRO:CA	1:A:53:PRO:C	1:A:54:SER:N	5	6.9
(1,367)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	9	6.89
(1,465)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	5	6.88
(1,252)	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:CB	1:A:22:ILE:CG1	1:A:22:ILE:CD1	14	6.88
(1,477)	1:A:93:PRO:N	1:A:93:PRO:CA	1:A:93:PRO:C	1:A:94:SER:N	2	6.79
(1,620)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	3	6.77
(1,181)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	14	6.7
(1,476)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	1:A:93:PRO:N	9	6.68
(1,609)	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	1:A:140:ALA:CA	1:A:140:ALA:C	5	6.66
(1,186)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	2	6.61
(1,192)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	8	6.6
(1,686)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	19	6.54
(1,363)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	9	6.54
(1,230)	1:A:15:ALA:N	1:A:15:ALA:CA	1:A:15:ALA:C	1:A:16:PRO:N	7	6.54
(1,270)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	12	6.51
(1,623)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	9	6.49
(1,363)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	14	6.48
(1,197)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	16	6.47
(1,625)	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	1:A:144:PRO:N	7	6.37
(1,387)	1:A:64:MET:CA	1:A:64:MET:CB	1:A:64:MET:CG	1:A:64:MET:SD	12	6.34
(1,607)	1:A:139:PRO:N	1:A:139:PRO:CA	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	13	6.26
(1,517)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:CB	1:A:109:ILE:CG1	5	6.24
(1,459)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	11	6.24
(1,235)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	4	6.23
(1,465)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	8	6.21
(1,391)	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	10	6.19
(1,393)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	19	6.17
(1,81)	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	1	6.13
(1,620)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:CB	1:A:142:THR:OG1	19	6.13
(1,52)	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:C	1:A:52:SER:N	11	6.11
(1,32)	1:A:27:ALA:N	1:A:27:ALA:CA	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	16	6.07
(1,459)	1:A:87:VAL:N	1:A:87:VAL:CA	1:A:87:VAL:CB	1:A:87:VAL:CG1	1	6.06
(1,81)	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	7	6.05
(1,498)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	11	6.04
(1,192)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	20	6.02
(1,452)	1:A:85:GLY:C	1:A:86:ARG:N	1:A:86:ARG:CA	1:A:86:ARG:C	13	6.0
(1,230)	1:A:15:ALA:N	1:A:15:ALA:CA	1:A:15:ALA:C	1:A:16:PRO:N	19	5.93
(1,18)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	10	5.91
(1,76)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	1:A:76:PRO:N	1	5.89
(1,282)	1:A:31:LEU:C	1:A:32:GLY:N	1:A:32:GLY:CA	1:A:32:GLY:C	14	5.89
(1,187)	1:A:4:GLU:C	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	10	5.8
(1,32)	1:A:27:ALA:N	1:A:27:ALA:CA	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	6	5.77
(1,74)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:C	1:A:74:GLY:N	16	5.65
(1,679)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	2	5.59
(1,600)	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	1:A:138:ASN:N	9	5.54
(1,74)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:C	1:A:74:GLY:N	3	5.53
(1,545)	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:CB	1:A:120:VAL:CG1	3	5.52
(1,040)	1.71.120. V/11.11	1.71.120. VIII.OA	1.71.120. VIII.OD	1.11.120. VIII.OGI		od on next nage



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,545)	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:CB	1:A:120:VAL:CG1	8	5.51
(1,310)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:CB	1:A:42:ILE:CG1	16	5.51
(1,18)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	2	5.48
(1,474)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	14	5.44
(1,369)	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	1:A:58:PHE:CD1	15	5.44
(1,32)	1:A:27:ALA:N	1:A:27:ALA:CA	1:A:27:ALA:C	1:A:28:MET:N	4	5.43
(1,80)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	12	5.41
(1,680)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	15	5.41
(1,72)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	15	5.38
(1,686)	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	1:A:158:SER:CA	1:A:158:SER:C	9	5.38
(1,611)	1:A:140:ALA:C	1:A:141:GLU:N	1:A:141:GLU:CA	1:A:141:GLU:C	17	5.32
(1,375)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:CB	1:A:61:TYR:CG	19	5.3
(1,235)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	14	5.25
(1,418)	1:A:73:PHE:C	1:A:74:GLY:N	1:A:74:GLY:CA	1:A:74:GLY:C	4	5.23
(1,88)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	7	5.19
(1,282)	1:A:31:LEU:C	1:A:32:GLY:N	1:A:32:GLY:CA	1:A:32:GLY:C	7	5.19
(1,609)	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	1:A:140:ALA:CA	1:A:140:ALA:C	4	5.18
(1,315)	1:A:42:ILE:C	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	20	5.17
(1,623)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	16	5.09
(1,84)	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	13	5.06
(1,598)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	1	5.06
(1,465)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	2	5.05
(1,223)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	10	5.04
(1,235)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	6	5.03
(1,204)	1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CA	1:A:7:PHE:C	1:A:8:VAL:N	3	5.01
(1,434)	1:A:79:GLY:C	1:A:80:GLY:N	1:A:80:GLY:CA	1:A:80:GLY:C	5	5.0
(1,68)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:GLU:N	8	4.99
(1,235)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	12	4.83
(1,579)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:CB	1:A:134:ILE:CG1	6	4.82
(1,76)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	1:A:76:PRO:N	14	4.81
(1,197)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	14	4.78
(1,235)	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	10	4.77
(1,162)	1:A:152:SER:N	1:A:152:SER:CA	1:A:152:SER:C	1:A:153:LEU:N	5	4.76
(1,502)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	13	4.74
(1,148)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:C	1:A:133:GLU:N	6	4.69
(1,355)	1:A:52:SER:N	1:A:52:SER:CA	1:A:52:SER:C	1:A:53:PRO:N	6	4.67
(1,290)	1:A:35:PHE:CA	1:A:35:PHE:CB	1:A:35:PHE:CG	1:A:35:PHE:CD1	15	4.67
(1,192)	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	2	4.67
(1,80)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	15	4.65
(1,50) $(1,52)$	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:C	1:A:52:SER:N	5	4.65
(1,32) $(1,465)$	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	12	4.65
(1,400) $(1,74)$	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:C	1:A:74:GLY:N	2	4.64
(1,684)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	1:A:158:SER:N	14	4.64
(1,004) $(1,301)$	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:CB	1:A:40:HIS:CG	13	4.62
(1,301) $(1,76)$	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	1:A:76:PRO:N	19	4.6
(1,76) $(1,606)$	1:A:138:ASN:N	1:A:73:F11E.CA 1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	1:A:139:PRO:N	10	4.6
(1,500) $(1,598)$	1:A:136:A5N:N 1:A:136:LEU:C	1:A:136:A5N:CA 1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:139:PRO:N 1:A:137:ASP:C	5	4.6
(1,398) $(1,82)$	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:137:ASF:CA 1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	19	4.59
(1,82) $(1,18)$	1:A:20:LEU:N	1:A:39:1HK:CA 1:A:20:LEU:CA	1:A:89:1HK:C 1:A:20:LEU:C	1:A:90:GLY:N 1:A:21:LEU:N	13	4.53
· · /	1:A:20:LEU:N 1:A:17:VAL:N	1:A:20:LEU:CA 1:A:17:VAL:CA	1:A:20:LEU:C 1:A:17:VAL:CB	1:A:21:LEU:N 1:A:17:VAL:CG1	8	4.52
(1,235)		1:A:17:VAL:CA 1:A:120:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB 1:A:120:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1 1:A:120:VAL:CG1	8	4.52
(1,546)	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:UA	1:A:120:VAL:UB	1:A:120:VAL:UGI		4.49



	Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,536 1.4.120-VALCN	-						` /
(1,623 1.3.142.THR.C	· · /						_
(1.74)	, ,						
(1,414	· · /						
(1,444 1:A-73-PHEN	/						
(1,76)	/						
(1,626) 1:A:144:PRO:N	· · /						
(1,230)	/						
(1,693 1:A-142:THR:C 1:A-142:THR:CA 1:A-142:THR:CB 1:A-142:THR:CG 4 4.36 (1,623 1:A-142:THR:C 1:A-143:ALA:CA 1:A-143:ALA:CA 1:A-143:ALA:CA 3:A-143:ALA:CA 3:A-143:ALA							
(1,623)	(' /						
(1,66)							
(1,76)	\ ' /						
(1,137)	(' /						
(1,249) 1:A:22:ILE:N	\ ' '						
(1,69) 1:A:139:PRO:C 1:A:140:ALA:N 1:A:140:ALA:CA 1:A:140:ALA:C 11 4.19 (1,78) 1:A:77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 12 4.16 (1,155) 1:A:148:ARG:C 1:A:149:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:C 16 4.13 (1,82) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:C 1:A:49:GLV:N 18 4.12 (1,428) 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:CB 1:A:78:GLU:CG 2 4.1 (1,598) 1:A:136:LEU:C 1:A:137:ASP:N 1:A:137:ASP:C 10 4.09 (1,56) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:78:PHE:C 1:A:78:PAB:C 10 4.09 (1,56) 1:A:58:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 15 4.06 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 15 4.05 (1,607) 1:A:139:PRO:N 1:A:139:PRO:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 20 4.05 (1,607) 1:A:139:PRO:N 1:A:139:PRO:CA 1:A:39:PRO:C 1:A:140:ALA:N 16 4.05 (1,52) 1:A:51:LYS:N 1:A:51:LYS:CA 1:A:51:LYS:C 1:A:52:SER:N 14 4.02 (1,172) 1:A:2:ASP:N 1:A:2:ASP:CA 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:GLU:CG 1 3.85 (1,235) 1:A:17:VAL:CA 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:VAL:CG 1 3.85 (1,235) 1:A:17:VAL:CA 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:VAL:CG 1 3.85 (1,235) 1:A:17:VAL:CB 1:A:157:VAL:CB 1:A:157:VAL:CG 1 3.85 (1,235) 1:A:17:VAL:CB 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:VAL:CG 1 3.85 (1,235) 1:A:17:VAL:CB 1:A:157:VAL:CB 1:A:157:VAL:CG 1 3.85 (1,235) 1:A:17:VAL:CB 1:A:157:VAL:CB 1:A:157:VAL:CG 1 3.87 (1,345) (1	` ' /						
(1,78)	(, ,						
(1,155) 1:A:148:ARG;C 1:A:149:THR;N 1:A:149:THR;CA 1:A:149:THR;C 16 4.13 (1,28) 1:A:38:THR;N 1:A:89:THR;CA 1:A:89:THR;C 1:A:478:GLU;CB 1:A:78:GLU;CG 2 4.1 (1,428) 1:A:78:GLU;CB 1:A:78:GLU;CB 1:A:78:GLU;CG 2 4.1 (1,598) 1:A:136:LEU;C 1:A:137:ASP;N 1:A:137:ASP;CA 1:A:137:ASP;C 10 4.09 (1,56) 1:A:58:PHE;N 1:A:58:PHE;CA 1:A:73:PHE;C 1:A:73:PHE;C 1:A:74:GLY;N 15 4.06 (1,74) 1:A:73:PHE;N 1:A:73:PHE;CA 1:A:73:PHE;C 1:A:74:GLY;N 20 4.05 (1,607) 1:A:139:PRO;N 1:A:139:PRO;CA 1:A:139:PRO;C 1:A:140:ALA;N 16 4.05 (1,52) 1:A:151:LYS;N 1:A:251:LYS;CA 1:A:251:LYS;C 1:A:251:LYS;C 1:A:351:LYS;C	· · /						
(1,82) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:C 1:A:90:GLY:N 18 4.12 (1,428) 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:CB 1:A:78:GLU:CB 1:A:78:GLU:CB 2 4.1 (1,598) 1:A:136:LEU:C 1:A:73:ASP:N 1:A:137:ASP:CA 1:A:137:ASP:C 10 4.09 (1,56) 1:A:35:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:37:PHE:C 1:A:45:PHE:CA 1:A:47:PHE:C 1:A:47:PHE:CA 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 15 4.06 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 15 4.05 (1,607) 1:A:139:PRO:D 1:A:139:PRO:CA 1:A:157:GLY:CN 16 4.05 (1,52) 1:A:51:LYS:N 1:A:51:LYS:CA 1:A:25:LSER:N 14 4.02 (1,52) 1:A:25:PRO:N 1:A:25:ASP:CA 1:A:25:ASP:C 1:A:39:PHE:N 19 3.9 (1,52) 1:A:17:VAL:N 1:A:17:VAL:CA 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:GLU:CG 1 3.81 (1,52) 1:A:14:A	· · /						
(1,428) 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:CB 1:A:78:GLU:CG 2 4.1 (1,598) 1:A:136:LEU:C 1:A:137:ASP:N 1:A:137:ASP:CA 1:A:137:ASP:C 10 4.09 (1,56) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ALA:N 15 4.06 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 20 4.05 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 20 4.05 (1,607) 1:A:33:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 20 4.05 (1,52) 1:A:35:LYS:N 1:A:13:PHE:CA 1:A:13:PHE:C 1:A:14:0:ALA:N 16 4.05 (1,52) 1:A:55:LYS:N 1:A:55:LYS:CA 1:A:51:SY:C 1:A:52:SER:N 14 4.02 (1,52) 1:A:15:CLU:N 1:A:15:CLU:CA 1:A:15:TYAL:CB 1:A:15:TYAL:CG 1 3.85 (1,235) 1:A:15:ALA:N 1:A:15:CHU:CA 1:A:15:CHU:CB 1:A:15:CHU:CG 1	· · /						
1.3.136; 1.3.136; 1.3.137;	/						
(1,56) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ALA:N 15 4.06 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 15 4.05 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 20 4.05 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 20 4.05 (1,67) 1:A:139:PRO:CA 1:A:139:PRO:C 1:A:74:GLY:N 20 4.05 (1,52) 1:A:51:LYS:N 1:A:25:LYS:CA 1:A:51:LYS:C 1:A:3:PHE:N 19 3.9 (1,681) 1:A:51:CYS:N 1:A:2:ASP:CA 1:A:2:ASP:C 1:A:3:PHE:N 19 3.9 (1,681) 1:A:15:ALS:N 1:A:15:GLU:CA 1:A:15:TVAL:CG 1:A:3:PHE:N 19 3.9 (1,58) 1:A:59:ALA:N 1:A:59:ALA:CA 1:A:17:VAL:CG 1:A:3:6:HIS:CA 1:A:15:GHIS:CA 1:A:15:GHIS:CG 1 3.83 (1,56) 1:A:3:PHE:N 1:A:3:6:HIS:CA 1:A:16:HIS:CA 1:A:16:GHIS:CA	· · /						
(1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 15 4.05 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 20 4.05 (1,607) 1:A:139:PRO:N 1:A:139:PRO:CA 1:A:139:PRO:C 1:A:140:ALA:N 16 4.05 (1,52) 1:A:2:ASP:N 1:A:2:ASP:CA 1:A:2:ASP:C 1:A:3:PHE:N 19 3.9 (1,681) 1:A:157:GLU:N 1:A:2:ASP:CA 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:GLU:CG 1 3.85 (1,235) 1:A:17:VAL:N 1:A:17:VAL:CA 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:GLU:CG 1 3.85 (1,258) 1:A:359:ALA:N 1:A:459:ALA:CA 1:A:157:ALA:CB 1:A:17:VAL:CGI 5 3.83 (1,58) 1:A:359:ALA:N 1:A:156:HIS:CA 1:A:156:HIS:CA 1:A:156:HIS:CB 1:A:360:ARG:N 16 3.81 (1,675) 1:A:155:LEU:C 1:A:156:HIS:N 1:A:156:HIS:CA 1:A:78:GLU:C 1:A:378:PHE:CA 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:CA	· · /						
(1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 20 4.05 (1,607) 1:A:139:PRO:N 1:A:139:PRO:CA 1:A:139:PRO:C 1:A:140:ALA:N 16 4.05 (1,52) 1:A:2:ASP:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:51:LYS:C 1:A:51:LYS:C 1:A:3:PHE:N 14 4.02 (1,172) 1:A:2:ASP:N 1:A:2:ASP:CA 1:A:3:PHE:N 19 3.9 (1,681) 1:A:157:GLU:N 1:A:157:GLU:CA 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:GLU:CG 1 3.85 (1,235) 1:A:157:VAL:N 1:A:157:VAL:CA 1:A:157:VAL:CB 1:A:157:VAL:CGI 5 3.83 (1,58) 1:A:59:ALA:N 1:A:59:ALA:CA 1:A:56:HIS:CA 1:A:156:HIS:C 15 3.78 (1,675) 1:A:155:LEU:C 1:A:156:HIS:N 1:A:156:HIS:CA 1:A:156:HIS:C 15 3.78 (1,426) 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:CA 1:A:15:AB:CA 1:A:15:AB:CA 1:A:15:AB:CA	(, ,						
(1,607)	(' /						
(1,52) 1:A:51:LYS:N 1:A:51:LYS:CA 1:A:51:LYS:C 1:A:52:SER:N 14 4.02 (1,72) 1:A:2:ASP:N 1:A:2:ASP:CA 1:A:2:ASP:C 1:A:3:PHE:N 19 3.9 (1,681) 1:A:157:GLU:N 1:A:157:GLU:CA 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:GLU:CG 1 3.85 (1,235) 1:A:17:VAL:N 1:A:17:VAL:CA 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:GLU:CG 5 3.83 (1,58) 1:A:59:ALA:N 1:A:59:ALA:CA 1:A:59:ALA:C 1:A:66:HIS:CB 1:A:156:HIS:C 15 3.78 (1,675) 1:A:155:LEU:C 1:A:156:HIS:N 1:A:156:HIS:CB 1:A:156:HIS:CB 1:A:156:HIS:CB 1:A:378:GLU:CB 1:A:478:GLU:CB 1:A:4	/						
(1,172) 1:A:2:ASP:N 1:A:2:ASP:CA 1:A:2:ASP:C 1:A:3:PHE:N 19 3.9 (1,681) 1:A:157:GLU:N 1:A:157:GLU:CA 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:GLU:CG 1 3.85 (1,235) 1:A:157:VAL:N 1:A:157:CALU:CA 1:A:157:VAL:CB 1:A:157:GLU:CG 5 3.83 (1,58) 1:A:59:ALA:N 1:A:59:ALA:CA 1:A:59:ALA:C 1:A:60:ARG:N 16 3.81 (1,675) 1:A:155:LEU:C 1:A:156:HIS:N 1:A:156:HIS:CA 1:A:156:HIS:C 15 3.78 (1,426) 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 1:A:478:GLU:CA 1:A:378:GLU:C 13 3.78 (1,56) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ALA:N 10 3.77 (1,230) 1:A:15:ALA:N 1:A:15:ALA:CA 1:A:3:PHE:CA 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:CA							
(1,681) 1:A:157:GLU:N 1:A:157:GLU:CA 1:A:157:GLU:CB 1:A:157:GLU:CG 1 3.85 (1,235) 1:A:17:VAL:N 1:A:17:VAL:CA 1:A:17:VAL:CB 1:A:17:VAL:CG1 5 3.83 (1,58) 1:A:59:ALA:N 1:A:59:ALA:CA 1:A:59:ALA:C 1:A:60:ARG:N 16 3.81 (1,575) 1:A:155:LEU:C 1:A:156:HIS:N 1:A:156:HIS:CA 1:A:156:HIS:C 15 3.78 (1,426) 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:C 13 3.78 (1,426) 1:A:75:PHE:N 1:A:56:HIS:CA 1:A:78:GLU:C 13 3.78 (1,426) 1:A:75:PHE:N 1:A:78:CHU:CA 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:CA 1:A:73:PHE:CA 1:A:74:GEU:N 10 3.72 (1,78) 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:	/						
(1,235) 1:A:17:VAL:N 1:A:17:VAL:CA 1:A:17:VAL:CB 1:A:17:VAL:CG1 5 3.83 (1,58) 1:A:59:ALA:N 1:A:59:ALA:CA 1:A:59:ALA:C 1:A:60:ARG:N 16 3.81 (1,575) 1:A:155:LEU:C 1:A:156:HIS:N 1:A:156:HIS:CA 1:A:156:HIS:C 15 3.78 (1,426) 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:C 13 3.78 (1,56) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ALA:N 10 3.77 (1,230) 1:A:15:ALA:N 1:A:15:ALA:CA 1:A:15:ALA:C 1:A:16:PRO:N 6 3.77 (1,714) 1:A:2:ASP:C 1:A:3:PHE:CA 1:A:3:PHE:C 4 3.75 (1,73) 1:A:72:GLU:C 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 11 3.73 (1,78) 1:A:77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 10 3.72 (1,333) 1:A:65:SER:C 1:A:66:ALA:N 1:A:66:ALA:CA 1:A:76:ALC:C 3 3.71	/						
(1,58) 1:A:59:ALA:N 1:A:59:ALA:CA 1:A:59:ALA:C 1:A:60:ARG:N 16 3.81 (1,675) 1:A:155:LEU:C 1:A:156:HIS:N 1:A:156:HIS:CA 1:A:156:HIS:C 15 3.78 (1,426) 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:C 13 3.78 (1,56) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ALA:N 10 3.77 (1,230) 1:A:15:ALA:N 1:A:15:ALA:CA 1:A:15:ALA:C 1:A:16:PRO:N 6 3.77 (1,74) 1:A:2:ASP:C 1:A:3:PHE:N 1:A:3:PHE:CA 1:A:3:PHE:C 4 3.75 (1,73) 1:A:72:GLU:C 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:78:GLU:N 10 3.72 (1,78) 1:A:77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:CA 1:A:78:GLU:N 10 3.72 (1,393) 1:A:66:AEA:C 1:A:66:AEA:CA 1:A:78:GLU:N 10 3.71 (1,409) 1:A:71:VAL:C 1:A:72:GLU:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:74:GLY:N 13 3.69	(' /		1				
(1,675) 1:A:155:LEU:C 1:A:156:HIS:N 1:A:156:HIS:CA 1:A:156:HIS:C 15 3.78 (1,426) 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:C 13 3.78 (1,56) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ALA:N 10 3.77 (1,230) 1:A:15:ALA:N 1:A:15:ALA:CA 1:A:15:ALA:C 1:A:16:PRO:N 6 3.77 (1,74) 1:A:2:ASP:C 1:A:3:PHE:N 1:A:3:PHE:CA 1:A:3:PHE:C 4 3.75 (1,73) 1:A:72:GLU:C 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 11 3.73 (1,78) 1:A:77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 10 3.72 (1,393) 1:A:65:SER:C 1:A:66:ALA:N 1:A:66:ALA:CA 1:A:66:ALA:C 3 3.71 (1,409) 1:A:71:VAL:C 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:73:PHE:C 12 3.7 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:74:GLY:N 13 3.69	(' /						
(1,426) 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 1:A:78:GLU:CA 1:A:78:GLU:C 13 3.78 (1,56) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ALA:N 10 3.77 (1,230) 1:A:15:ALA:N 1:A:15:ALA:CA 1:A:15:ALA:C 1:A:16:PRO:N 6 3.77 (1,174) 1:A:2:ASP:C 1:A:3:PHE:N 1:A:3:PHE:CA 1:A:3:PHE:C 4 3.75 (1,73) 1:A:72:GLU:C 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 11 3.73 (1,78) 1:A:77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 10 3.72 (1,393) 1:A:65:SER:C 1:A:66:ALA:N 1:A:66:ALA:CA 1:A:66:ALA:C 3 3.71 (1,409) 1:A:71:VAL:C 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:C 12 3.7 (1,409) 1:A:71:VAL:C 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:143:ASP:C 1:A:145:ASP:C 1:A:145:ASP:C 1:A:145:ASP:C 1:A:145:ASP:C 1:A:145:ASP:C 1:A:145:ASP:C 1:A:144:CLY:N 13 3.69 <	/						
(1,56) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ALA:N 10 3.77 (1,230) 1:A:15:ALA:N 1:A:15:ALA:CA 1:A:15:ALA:C 1:A:16:PRO:N 6 3.77 (1,174) 1:A:2:ASP:C 1:A:3:PHE:N 1:A:3:PHE:CA 1:A:3:PHE:C 4 3.75 (1,73) 1:A:72:GLU:C 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 11 3.73 (1,78) 1:A:77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 10 3.72 (1,393) 1:A:65:SER:C 1:A:66:ALA:N 1:A:66:ALA:CA 1:A:66:ALA:C 3 3.71 (1,409) 1:A:71:VAL:C 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:C 12 3.7 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 13 3.69 (1,629) 1:A:144:PRO:C 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:C 6 3.66 (1,625) 1:A:143:ALA:N 1:A:75:PHE:CA 1:A:75:PHE:C 1:A:76:PRO:N 3 3.63	` '						
(1,230) 1:A:15:ALA:N 1:A:15:ALA:CA 1:A:15:ALA:C 1:A:16:PRO:N 6 3.77 (1,174) 1:A:2:ASP:C 1:A:3:PHE:N 1:A:3:PHE:CA 1:A:3:PHE:C 4 3.75 (1,73) 1:A:72:GLU:C 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 11 3.73 (1,78) 1:A:77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 10 3.72 (1,393) 1:A:65:SER:C 1:A:66:ALA:N 1:A:66:ALA:CA 1:A:66:ALA:C 3 3.71 (1,409) 1:A:71:VAL:C 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 12 3.7 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 13 3.69 (1,629) 1:A:143:ALA:N 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:C 6 3.66 (1,625) 1:A:143:ALA:N 1:A:75:PHE:CA 1:A:75:PHE:C 1:A:76:PRO:N 3 3.63 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:76:PRO:N 3 3.63	· · /						
(1,174) 1:A:2:ASP:C 1:A:3:PHE:N 1:A:3:PHE:CA 1:A:3:PHE:C 4 3.75 (1,73) 1:A:72:GLU:C 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 11 3.73 (1,78) 1:A:77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 10 3.72 (1,393) 1:A:65:SER:C 1:A:66:ALA:N 1:A:66:ALA:CA 1:A:66:ALA:C 3 3.71 (1,409) 1:A:71:VAL:C 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 12 3.7 (1,409) 1:A:71:VAL:C 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 13 3.69 (1,529) 1:A:144:PRO:C 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:C 6 3.66 (1,625) 1:A:143:ALA:N 1:A:143:ALA:CA 1:A:143:ALA:C 1:A:144:PRO:N 14 3.64 (1,76) 1:A:75:PHE:N 1:A:75:PHE:CA 1:A:75:PHE:C 1:A:76:PRO:N 3 3.63 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:C 1:A:73:PHE:C 1:A:73:PHE:C 3.50	· · /						
(1,73) 1:A:72:GLU:C 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 11 3.73 (1,78) 1:A:77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 10 3.72 (1,393) 1:A:65:SER:C 1:A:66:ALA:N 1:A:66:ALA:CA 1:A:66:ALA:C 3 3.71 (1,409) 1:A:71:VAL:C 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 12 3.7 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 13 3.69 (1,629) 1:A:144:PRO:C 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:C 6 3.66 (1,625) 1:A:143:ALA:N 1:A:143:ALA:CA 1:A:143:ALA:C 1:A:144:PRO:N 14 3.64 (1,76) 1:A:75:PHE:N 1:A:75:PHE:CA 1:A:75:PHE:C 1:A:76:PRO:N 3 3.63 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:73:PHE:C 3.61 (1,355) 1:A:52:SER:N 1:A:52:SER:CA 1:A:53:PRO:N 7 3.61 (1,73	· · /						
(1,78) 1:A:77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:C 1:A:78:GLU:N 10 3.72 (1,393) 1:A:65:SER:C 1:A:66:ALA:N 1:A:66:ALA:CA 1:A:66:ALA:C 3 3.71 (1,409) 1:A:71:VAL:C 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 12 3.7 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 13 3.69 (1,629) 1:A:144:PRO:C 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:C 6 3.66 (1,625) 1:A:143:ALA:N 1:A:143:ALA:CA 1:A:143:ALA:C 1:A:74:PHE:CN 14 3.64 (1,76) 1:A:75:PHE:N 1:A:75:PHE:CA 1:A:75:PHE:C 1:A:76:PRO:N 3 3.63 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 12 3.61 (1,355) 1:A:52:SER:N 1:A:52:SER:CA 1:A:52:SER:C 1:A:73:PHE:C 5 3.59 (1,270) 1:A:28:MET:C 1:A:73:PHE:N 1:A:29:SER:CA 1:A:29:SER:C 4 3.54 <tr< td=""><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr<>							
(1,393) 1:A:65:SER:C 1:A:66:ALA:N 1:A:66:ALA:CA 1:A:66:ALA:C 3 3.71 (1,409) 1:A:71:VAL:C 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 12 3.7 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 13 3.69 (1,629) 1:A:144:PRO:C 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:C 6 3.66 (1,625) 1:A:143:ALA:N 1:A:143:ALA:CA 1:A:143:ALA:C 1:A:144:PRO:N 14 3.64 (1,76) 1:A:75:PHE:N 1:A:75:PHE:CA 1:A:75:PHE:C 1:A:76:PRO:N 3 3.63 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 12 3.61 (1,355) 1:A:52:SER:N 1:A:52:SER:CA 1:A:52:SER:C 1:A:53:PRO:N 7 3.61 (1,73) 1:A:72:GLU:C 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:CA 1:A:29:SER:C 4 3.57 (1,459) 1:A:87:VAL:N 1:A:87:VAL:CA 1:A:87:VAL:CB 1:A:87:VAL:CG1 4	· · /						
(1,409) 1:A:71:VAL:C 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 12 3.7 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 13 3.69 (1,629) 1:A:144:PRO:C 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:C 6 3.66 (1,625) 1:A:143:ALA:N 1:A:143:ALA:CA 1:A:143:ALA:C 1:A:144:PRO:N 14 3.64 (1,76) 1:A:75:PHE:N 1:A:75:PHE:CA 1:A:75:PHE:C 1:A:76:PRO:N 3 3.63 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:74:GLY:N 12 3.61 (1,355) 1:A:52:SER:N 1:A:52:SER:CA 1:A:52:SER:C 1:A:53:PRO:N 7 3.61 (1,73) 1:A:72:GLU:C 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 5 3.59 (1,270) 1:A:28:MET:C 1:A:29:SER:N 1:A:29:SER:CA 1:A:29:SER:CA 1:A:429:SER:C 4 3.54 (1,498) 1:A:103:ILE:CA 1:A:103:ILE:CB 1:A:103:ILE:CGI 1:A:60:	, ,						
(1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 13 3.69 (1,629) 1:A:144:PRO:C 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:C 6 3.66 (1,625) 1:A:143:ALA:N 1:A:143:ALA:CA 1:A:143:ALA:C 1:A:144:PRO:N 14 3.64 (1,76) 1:A:75:PHE:N 1:A:75:PHE:CA 1:A:75:PHE:C 1:A:76:PRO:N 3 3.63 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 12 3.61 (1,355) 1:A:52:SER:N 1:A:52:SER:CA 1:A:52:SER:C 1:A:53:PRO:N 7 3.61 (1,73) 1:A:72:GLU:C 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 5 3.59 (1,270) 1:A:28:MET:C 1:A:29:SER:N 1:A:29:SER:CA 1:A:29:SER:CA 1:A:87:VAL:CB 1:A:87:VAL:CG1 4 3.54 (1,498) 1:A:103:ILE:CA 1:A:103:ILE:CB 1:A:60:ARG:CB 1:A:60:ARG:CG 9 3.53 (1,371) 1:A:60:ARG:N 1:A:60:ARG:CA 1:A:60:	· · /						
(1,629) 1:A:144:PRO:C 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:C 6 3.66 (1,625) 1:A:143:ALA:N 1:A:143:ALA:CA 1:A:143:ALA:C 1:A:144:PRO:N 14 3.64 (1,76) 1:A:75:PHE:N 1:A:75:PHE:CA 1:A:75:PHE:C 1:A:76:PRO:N 3 3.63 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 12 3.61 (1,355) 1:A:52:SER:N 1:A:52:SER:CA 1:A:52:SER:C 1:A:53:PRO:N 7 3.61 (1,73) 1:A:72:GLU:C 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 5 3.59 (1,270) 1:A:88:MET:C 1:A:29:SER:N 1:A:29:SER:CA 1:A:29:SER:CA 1:A:29:SER:C 4 3.57 (1,459) 1:A:87:VAL:N 1:A:87:VAL:CA 1:A:87:VAL:CB 1:A:87:VAL:CG1 4 3.53 (1,371) 1:A:60:ARG:N 1:A:60:ARG:CA 1:A:60:ARG:CB 1:A:60:ARG:CB 1:A:60:ARG:CG 9 3.53	· · /						
(1,625) 1:A:143:ALA:N 1:A:143:ALA:CA 1:A:143:ALA:C 1:A:144:PRO:N 14 3.64 (1,76) 1:A:75:PHE:N 1:A:75:PHE:CA 1:A:75:PHE:C 1:A:76:PRO:N 3 3.63 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 12 3.61 (1,355) 1:A:52:SER:N 1:A:52:SER:CA 1:A:52:SER:C 1:A:53:PRO:N 7 3.61 (1,73) 1:A:72:GLU:C 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 5 3.59 (1,270) 1:A:28:MET:C 1:A:29:SER:N 1:A:29:SER:CA 1:A:29:SER:C 4 3.57 (1,459) 1:A:87:VAL:N 1:A:87:VAL:CA 1:A:87:VAL:CB 1:A:87:VAL:CG1 4 3.54 (1,498) 1:A:103:ILE:CA 1:A:103:ILE:CB 1:A:60:ARG:CB 1:A:60:ARG:CG 9 3.53 (1,371) 1:A:60:ARG:N 1:A:60:ARG:CA 1:A:60:ARG:CB 1:A:60:ARG:CB 1:A:60:ARG:CG 9 3.53	/						
(1,76) 1:A:75:PHE:N 1:A:75:PHE:CA 1:A:75:PHE:C 1:A:76:PRO:N 3 3.63 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 12 3.61 (1,355) 1:A:52:SER:N 1:A:52:SER:CA 1:A:52:SER:C 1:A:53:PRO:N 7 3.61 (1,73) 1:A:72:GLU:C 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 5 3.59 (1,270) 1:A:28:MET:C 1:A:29:SER:N 1:A:29:SER:CA 1:A:29:SER:C 4 3.57 (1,459) 1:A:87:VAL:N 1:A:87:VAL:CA 1:A:87:VAL:CB 1:A:87:VAL:CG1 4 3.54 (1,498) 1:A:103:ILE:CA 1:A:103:ILE:CB 1:A:103:ILE:CG1 1:A:103:ILE:CD1 9 3.53 (1,371) 1:A:60:ARG:N 1:A:60:ARG:CA 1:A:60:ARG:CB 1:A:60:ARG:CG 9 3.53	· · /						
(1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 12 3.61 (1,355) 1:A:52:SER:N 1:A:52:SER:CA 1:A:52:SER:C 1:A:53:PRO:N 7 3.61 (1,73) 1:A:72:GLU:C 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 5 3.59 (1,270) 1:A:28:MET:C 1:A:29:SER:N 1:A:29:SER:CA 1:A:29:SER:C 4 3.57 (1,459) 1:A:87:VAL:N 1:A:87:VAL:CA 1:A:87:VAL:CB 1:A:87:VAL:CG1 4 3.54 (1,498) 1:A:103:ILE:CA 1:A:103:ILE:CB 1:A:103:ILE:CG1 1:A:103:ILE:CD1 9 3.53 (1,371) 1:A:60:ARG:N 1:A:60:ARG:CA 1:A:60:ARG:CB 1:A:60:ARG:CG 9 3.53	(' /						
(1,355) 1:A:52:SER:N 1:A:52:SER:CA 1:A:52:SER:C 1:A:53:PRO:N 7 3.61 (1,73) 1:A:72:GLU:C 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 5 3.59 (1,270) 1:A:28:MET:C 1:A:29:SER:N 1:A:29:SER:CA 1:A:29:SER:C 4 3.57 (1,459) 1:A:87:VAL:N 1:A:87:VAL:CA 1:A:87:VAL:CB 1:A:87:VAL:CG1 4 3.54 (1,498) 1:A:103:ILE:CA 1:A:103:ILE:CB 1:A:103:ILE:CG1 1:A:103:ILE:CD1 9 3.53 (1,371) 1:A:60:ARG:N 1:A:60:ARG:CA 1:A:60:ARG:CB 1:A:60:ARG:CG 9 3.53	/						
(1,73) 1:A:72:GLU:C 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 5 3.59 (1,270) 1:A:28:MET:C 1:A:29:SER:N 1:A:29:SER:CA 1:A:29:SER:C 4 3.57 (1,459) 1:A:87:VAL:N 1:A:87:VAL:CA 1:A:87:VAL:CB 1:A:87:VAL:CG1 4 3.54 (1,498) 1:A:103:ILE:CA 1:A:103:ILE:CB 1:A:103:ILE:CG1 1:A:103:ILE:CD1 9 3.53 (1,371) 1:A:60:ARG:N 1:A:60:ARG:CA 1:A:60:ARG:CB 1:A:60:ARG:CG 9 3.53	` /						
(1,270) 1:A:28:MET:C 1:A:29:SER:N 1:A:29:SER:CA 1:A:29:SER:C 4 3.57 (1,459) 1:A:87:VAL:N 1:A:87:VAL:CA 1:A:87:VAL:CB 1:A:87:VAL:CG1 4 3.54 (1,498) 1:A:103:ILE:CA 1:A:103:ILE:CB 1:A:103:ILE:CG1 1:A:103:ILE:CD1 9 3.53 (1,371) 1:A:60:ARG:N 1:A:60:ARG:CA 1:A:60:ARG:CB 1:A:60:ARG:CG 9 3.53							
(1,459) 1:A:87:VAL:N 1:A:87:VAL:CA 1:A:87:VAL:CB 1:A:87:VAL:CG1 4 3.54 (1,498) 1:A:103:ILE:CA 1:A:103:ILE:CB 1:A:103:ILE:CG1 1:A:103:ILE:CD1 9 3.53 (1,371) 1:A:60:ARG:N 1:A:60:ARG:CA 1:A:60:ARG:CB 1:A:60:ARG:CG 9 3.53	/					5	
(1,498) 1:A:103:ILE:CA 1:A:103:ILE:CB 1:A:103:ILE:CG1 1:A:103:ILE:CD1 9 3.53 (1,371) 1:A:60:ARG:N 1:A:60:ARG:CA 1:A:60:ARG:CB 1:A:60:ARG:CG 9 3.53	` ' /					4	
(1,371) 1:A:60:ARG:N 1:A:60:ARG:CA 1:A:60:ARG:CB 1:A:60:ARG:CG 9 3.53	` ' /					4	
	(1,498)	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:CB	1:A:103:ILE:CG1	1:A:103:ILE:CD1	9	3.53
(1,653) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CB 1:A:151:VAL:CG1 3 3.42	(1,371)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA				3.53
	(1,653)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:CB	1:A:151:VAL:CG1	3	3.42



$\frac{\mathbf{ation} \ (\circ)}{3.4}$
2.4
3.38
3.33
3.32
3.29
3.24
3.23
3.2
3.19
3.17
3.17
3.16
3.14
3.14
3.11
3.1
3.08
3.08
3.07
3.04
2.99
2.98
2.96
2.95
2.92
2.91
2.89
2.89
2.89
2.87
2.87
2.86
2.85
2.85
2.83
2.82
2.82
2.79
2.77
2.75
2.72
2.67
2.66
2.64
2.61
2.61
2.61
2.6
2.6
2.59
4.00



(1,673		ed from previous pag					
1,133	Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,81)							
1,035	· · /						
(1,103)	· · /						
(1,86)	· · /						
(1,364)	· · /						
(1,57)	· · /					6	
(1,49)	(' /		1:A:56:PRO:CA				
(1,40)	\ ' /						
(1,46)	(1,49)						
(1,45) 1:A:37:ALA:C	(' /						
(1,159)	(' /						
(1,144) 1:A:130:GLU:N 1:A:130:GLU:CA 1:A:130:GLU:C 1:A:131:ALA:N 19 2.37 (1,142) 1:A:127:LEU:N 1:A:127:LEU:CA 1:A:127:LEU:C 1:A:128:SER:N 16 2.35 (1,77) 1:A:76:PRO:C 1:A:77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:	(1,45)	1:A:37:ALA:C	1:A:38:GLY:N				
(1,142) 1:A:127;LEU:N 1:A:127;LEU:CA 1:A:127;LEU:C 1:A:128;SER:N 16 2:35 (1,77) 1:A:76;PRO:C 1:A:77;VAL:N 1:A:77;VAL:CA 1:A:77;VAL:C 13 2:31 (1,545) 1:A:120;VAL:N 1:A:120;VAL:CB 1:A:120;VAL:CB 1:A:120;VAL:CG 7 2:29 (1,607) 1:A:139;PRO:N 1:A:139;PRO:CA 1:A:139;PRO:C 1:A:140;ALA:N 9 2:24 (1,644) 1:A:89;THR:CB 1:A:89;THR:CB 1:A:89;THR:CB 1:A:89;THR:CB 1:A:89;THR:CB 1:A:89;THR:CB 1:A:89;THR:CB 1:A:430;TR:CB 1:A:430;TR:C	(1,159)	1:A:150:ARG:C	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:C	15	2.37
1.4.77 1.A.76-PRO:C	(1,144)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	1:A:131:ALA:N	19	2.37
(1,545) 1:A:120:VAL:N 1:A:120:VAL:CA 1:A:120:VAL:CB 1:A:120:VAL:CG1 7 2:29 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 5 2:28 (1,607) 1:A:139:PRO:N 1:A:139:PRO:CA 1:A:139:PRO:C 1:A:140:ALA:N 9 2:24 (1,607) 1:A:143:PHR:C 1:A:139:PRO:C 1:A:140:ALA:N 9 2:24 (1,623) 1:A:142:THR:C 1:A:143:ALA:N 1:A:343:ALA:CA 1:A:143:ALA:CC 1 2:21 (1,48) 1:A:39:TYR:C 1:A:18:LVS:N 1:A:18:IVS:N 1:A:18:IVS:CC 11 2:21 (1,23) 1:A:17:METC 1:A:18:LVS:N 1:A:18:IVS:N 1:A:18:IVS:CC 11 2:19 (1,607) 1:A:13:39:PRO:N 1:A:139:PRO:CA 1:A:139:PRO:C 1:A:140:ALA:N 2 2:18 (1,23) 1:A:22:ILE:C 1:A:23:ARG:N 1:A:23:ARG:CA 1:A:23:ARG:C 8 2:18 (1,190) 1:A:3-5:CYS:N 1:A:35:CYS:CA 1:A:5:CYS:C 1:A:4:6:GLN:N 17 2:18	(1,142)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	16	2.35
1,74 1:A:73:PHE:N	(1,77)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C	13	2.31
1.4.139:PRO:N	(1,545)	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:CB	1:A:120:VAL:CG1	7	2.29
(1,464) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 15 2.22 (1,623) 1:A:142:THR:C 1:A:143:ALA:N 1:A:143:ALA:CA 1:A:143:ALA:C 1 2.21 (1,48) 1:A:39:TYR:N 1:A:139:TYR:CA 1:A:40:HIS:N 12 2.22 (1,23) 1:A:117:MET:C 1:A:118:LYS:N 1:A:118:LYS:CA 1:A:40:HIS:YS:C 11 2.19 (1,607) 1:A:139:PRO:N 1:A:139:PRO:CA 1:A:139:PRO:C 1:A:140:ALA:N 2 2.18 (1,23) 1:A:21:AE:C 1:A:23:AGGN 1:A:23:ARG:CA 1:A:40:ALA:N 2 2.18 (1,190) 1:A:5:CYS:N 1:A:5:CYS:C 1:A:46:GLN:N 18 2.18 (1,190) 1:A:14:A:CHIE:C 1:A:133:GU:CA 1:A:133:GU:C 1:A:134:LEE:N 17 2.18 (1,72) 1:A:17:VAL:N 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:C 19 2.16 (1,629) 1:A:144:PRO:C 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:C 19 2.16 (1,362) 1:A	(1,74)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:C	1:A:74:GLY:N	5	2.28
(1,623) 1:A:142:THR:C 1:A:143:ALA:N 1:A:143:ALA:CA 1:A:143:ALA:C 1 2.21 (1,48) 1:A:39:TYR:N 1:A:39:TYR:CA 1:A:39:TYR:C 1:A:40:HIS:N 12 2.2 (1,133) 1:A:117:MET:C 1:A:118:LYS:CA 1:A:140:ALA:N 2 2.18 (1,607) 1:A:139:PRO:N 1:A:139:PRO:CA 1:A:139:PRO:C 1:A:140:ALA:N 2 2.18 (1,23) 1:A:22:LIE:C 1:A:23:ARG:N 1:A:33:ARG:CA 1:A:23:ARG:C 8 2.18 (1,190) 1:A:5:CYS:N 1:A:5:CYS:CA 1:A:5:CYS:C 1:A:6:GLN:N 18 2.18 (1,150) 1:A:133:GLU:N 1:A:133:GLU:C 1:A:133:GLU:C 1:A:133:GLU:C 1:A:133:GLU:C 1:A:133:GLU:C 1:A:133:GLU:C 1:A:133:GLU:C 1:A:133:GLU:C 1:A:134:LEE:N 17 2.18 (1,72) 1:A:142:APC:C 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:C 1:A:145:ASP:C 19 2.16 (1,362) 1:A:142:APC:C 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:C 1:A:145:ASP:C 19 2.16	(1,607)	1:A:139:PRO:N	1:A:139:PRO:CA	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	9	2.24
(1,48) 1:A:39:TYR:N 1:A:39:TYR:CA 1:A:39:TYR:C 1:A:40:HIS:N 12 2.2 (1,23) 1:A:117:MET:C 1:A:118:LYS:N 1:A:118:LYS:CA 1:A:118:LYS:C 11 2.19 (1,607) 1:A:319:PRO:N 1:A:139:PRO:CA 1:A:139:PRO:C 1:A:140:AALA:N 2 2.18 (1,23) 1:A:22:LE:C 1:A:23:ARG:N 1:A:23:ARG:CA 1:A:23:ARG:C 8 2.18 (1,190) 1:A:5:CYS:N 1:A:5:CYS:CA 1:A:33:GLU:C 1:A:133:GLU:C 1:A:134:LE:N 17 2.18 (1,72) 1:A:71:VAL:N 1:A:131:GLU:CA 1:A:133:GLU:C 1:A:134:LE:N 17 2.18 (1,72) 1:A:144:PRO:C 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:C 19 2.16 (1,362) 1:A:414:PRO:C 1:A:145:ASP:N 1:A:15-ABP:C 19 2.16 (1,362) 1:A:22:LE:C 1:A:23:ARG:N 1:A:23:ARG:C 1:A:145:ASP:C 19 2.16 (1,546) 1:A:144:PRD:C 1:A:120:VAL:CA 1:A:149:THR:N 1:A:140:THR:CA 1:A:140:THR:CA 1:A:	(1,464)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	15	2.22
(1,123) 1:A:117:MET:C 1:A:118:LYS:N 1:A:118:LYS:CA 1:A:118:LYS:C 11 2.19 (1,607) 1:A:139:PRO:N 1:A:139:PRO:CA 1:A:139:PRO:C 1:A:140:ALA:N 2 2.18 (1,23) 1:A:22:ILE:C 1:A:23:ARG:N 1:A:23:ARG:CA 1:A:23:ARG:C 8 2.18 (1,190) 1:A:5:CYS:N 1:A:5:CYS:CA 1:A:5:CYS:C 1:A:6G:IN:N 18 2.18 (1,150) 1:A:33:GLU:N 1:A:133:GLU:CA 1:A:133:GLU:C 1:A:133:GLU:N 17 2.18 (1,72) 1:A:71:VAL:N 1:A:71:VAL:CA 1:A:71:VAL:C 1:A:72:GLU:N 16 2.17 (1,629) 1:A:144:PRO:C 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:C 19 2.16 (1,362) 1:A:25:GLY:N 1:A:23:ARG:N 1:A:23:ARG:CA 1:A:23:ARG:C 19 2.16 (1,364) 1:A:20:VAL:N 1:A:120:VAL:CA 1:A:34:149:THR:C 5 2.16 (1,546) 1:A:120:VAL:CA 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:C 5 2.15 <th< td=""><td>(1,623)</td><td>1:A:142:THR:C</td><td>1:A:143:ALA:N</td><td>1:A:143:ALA:CA</td><td>1:A:143:ALA:C</td><td>1</td><td>2.21</td></th<>	(1,623)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	1	2.21
(1,607) 1:A:139:PRO:N 1:A:139:PRO:CA 1:A:139:PRO:C 1:A:140:ALA:N 2 2.18 (1,23) 1:A:22:ILE:C 1:A:23:ARG:N 1:A:23:ARG:CA 1:A:23:ARG:C 8 2.18 (1,190) 1:A:5:CYS:N 1:A:5:CYS:CA 1:A:5:CYS:C 1:A:6;GLN:N 18 2.18 (1,150) 1:A:133:GLU:N 1:A:133:GLU:CA 1:A:133:GLU:C 1:A:134:ILE:N 17 2.18 (1,72) 1:A:71:VAL:N 1:A:71:VAL:CA 1:A:71:VAL:C 1:A:72:GLU:N 16 2.17 (1,629) 1:A:144:PRO:C 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:C 19 2.16 (1,362) 1:A:55:GLY:N 1:A:55:GLY:CA 1:A:55:GLY:C 1:A:56:PRO:N 16 2.16 (1,362) 1:A:22:ILE:C 1:A:23:ARG:N 1:A:23:ARG:CA 1:A:23:ARG:C 5 2.16 (1,546) 1:A:120:VAL:N 1:A:120:VAL:CA 1:A:120:VAL:CB 1:A:120:VAL:CG 6 2.15 (1,155) 1:A:148:ARG:C 1:A:149:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:C 5 2.15 (1,230) 1:A:15:ALA:N 1:A:15:ALA:CA 1:A:15:ALA:C 1:A:16:PRO:N 4 2.14 (1,464) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OGI 13 2.13 (1,364) 1:A:56:PRO:N 1:A:56:PRO:CA 1:A:75:PRE:C 1:A:75:PRE:N 1:A:75:PRE:CA 1:A:75:PRE:C 1:A:76:PRO:N 18 2.13 (1,76) 1:A:40:HIS:N 1:A:40:HIS:CA 1:A:40:HIS:C 1:A:41:A3P:N 9 2.12 (1,464) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OGI 9 2.1 (1,464) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:40:HIS:C 1:A:76:PRO:N 18 2.13 (1,76) 1:A:40:HIS:N 1:A:40:HIS:CA 1:A:40:HIS:C 1:A:40	(1,48)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:C	1:A:40:HIS:N	12	2.2
(1,23) 1:A:22:ILE:C 1:A:23:ARG:N 1:A:23:ARG:CA 1:A:23:ARG:C 8 2.18 (1,190) 1:A:5:CYS:N 1:A:5:CYS:CA 1:A:5:CYS:C 1:A:6:GLN:N 18 2.18 (1,150) 1:A:133:GLU:N 1:A:133:GLU:CA 1:A:133:GLU:C 1:A:134:ILE:N 17 2.18 (1,72) 1:A:71:VAL:N 1:A:71:VAL:CA 1:A:71:VAL:C 1:A:134:ILE:N 17 2.18 (1,629) 1:A:144:PRO:C 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:C 19 2.16 (1,362) 1:A:25:GLY:N 1:A:25:GLY:CA 1:A:25:GLY:C 1:A:35:GPRO:N 16 2.17 (1,362) 1:A:42:PRO:C 1:A:45:ASP:CA 1:A:45:GPRO:N 16 2.16 (1,23) 1:A:22:ILE:C 1:A:23:ARG:N 1:A:23:ARG:CA 1:A:23:ARG:C 5 2.16 (1,546) 1:A:120:VAL:N 1:A:120:VAL:CA 1:A:120:VAL:CB 1:A:120:VAL:CGI 6 2.15 (1,346) 1:A:143:RRG:C 1:A:149:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:C 5 2.15	(1,123)	1:A:117:MET:C	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:C	11	2.19
(1,190) 1:A:5:CYS:N 1:A:5:CYS:CA 1:A:5:CYS:C 1:A:6:GLN:N 18 2.18 (1,150) 1:A:133:GLU:N 1:A:133:GLU:CA 1:A:133:GLU:C 1:A:134:LE:N 17 2.18 (1,72) 1:A:71:VAL:N 1:A:71:VAL:CA 1:A:71:VAL:C 1:A:72:GLU:N 16 2.17 (1,629) 1:A:144:PRO:C 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:C 19 2.16 (1,362) 1:A:55:GLY:N 1:A:55:GLY:CA 1:A:55:GLY:C 1:A:56:PRO:N 16 2.16 (1,362) 1:A:22:LE:C 1:A:23:ARG:N 1:A:23:ARG:C 5 2.16 (1,230) 1:A:22:LE:C 1:A:23:ARG:N 1:A:23:ARG:C 5 2.16 (1,546) 1:A:149:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:C 5 2.15 (1,230) 1:A:15:ALA:N 1:A:15:ALA:CA 1:A:15:ALA:C 1:A:16:PRO:N 4 2.14 (1,464) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 13 2.13 (1,364) 1:A:56:PRO:N	(1,607)	1:A:139:PRO:N	1:A:139:PRO:CA	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	2	2.18
(1,150) 1:A:133:GLU:N 1:A:133:GLU:CA 1:A:133:GLU:C 1:A:134:ILE:N 17 2.18 (1,72) 1:A:71:VAL:N 1:A:71:VAL:CA 1:A:71:VAL:C 1:A:72:GLU:N 16 2.17 (1,629) 1:A:144:PRO:C 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:C 19 2.16 (1,362) 1:A:55:GLY:N 1:A:55:GLY:CA 1:A:55:GLY:C 1:A:56:PRO:N 16 2.16 (1,362) 1:A:25:GLY:N 1:A:25:GLY:CA 1:A:55:GLY:C 1:A:56:PRO:N 16 2.16 (1,362) 1:A:22:ILE:C 1:A:23:ARG:N 1:A:23:ARG:CA 1:A:23:ARG:C 5 2.16 (1,546) 1:A:120:VAL:N 1:A:120:VAL:CA 1:A:120:VAL:CB 1:A:120:VAL:CG1 6 2.15 (1,456) 1:A:148:ARG:C 1:A:149:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:15:ALCB 1:A:16:PRO:N 4 2.15 (1,230) 1:A:15:ALA:N 1:A:489:THR:CA 1:A:15:ALA:C 1:A:16:PRO:N 4 2.14 (1,464) 1:A:89:THR:N 1:A:56:PRO:CA 1:A:56:PRO:C 1	(1,23)	1:A:22:ILE:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	8	2.18
(1,72) 1:A:71:VAL:N 1:A:71:VAL:CA 1:A:71:VAL:C 1:A:72:GLU:N 16 2.17 (1,629) 1:A:144:PRO:C 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:C 19 2.16 (1,362) 1:A:55:GLY:N 1:A:55:GLY:CA 1:A:55:GLY:C 1:A:56:PRO:N 16 2.16 (1,23) 1:A:22:ILE:C 1:A:23:ARG:N 1:A:23:ARG:CA 1:A:23:ARG:C 5 2.16 (1,546) 1:A:120:VAL:N 1:A:120:VAL:CB 1:A:120:VAL:CG1 6 2.15 (1,545) 1:A:148:ARG:C 1:A:149:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:C 5 2.15 (1,230) 1:A:15:ALA:N 1:A:15:ALA:CA 1:A:15:ALA:C 1:A:16:PRO:N 4 2.14 (1,364) 1:A:89:THR:N 1:A:489:THR:CB 1:A:89:THR:CB 1:A:46:PRO:N 4 2.13 (1,364) 1:A:56:PRO:N 1:A:56:PRO:C 1:A:57:PRO:N 18 2.13 (1,76) 1:A:40:HIS:N 1:A:40:HIS:CA 1:A:40:HIS:C 1:A:41:ASP:N 9 2.12 (1,50) </td <td>(1,190)</td> <td>1:A:5:CYS:N</td> <td>1:A:5:CYS:CA</td> <td>1:A:5:CYS:C</td> <td>1:A:6:GLN:N</td> <td>18</td> <td>2.18</td>	(1,190)	1:A:5:CYS:N	1:A:5:CYS:CA	1:A:5:CYS:C	1:A:6:GLN:N	18	2.18
(1,629) 1:A:144:PRO:C 1:A:145:ASP:N 1:A:145:ASP:CA 1:A:145:ASP:C 19 2.16 (1,362) 1:A:55:GLY:N 1:A:55:GLY:CA 1:A:55:GLY:C 1:A:56:PRO:N 16 2.16 (1,23) 1:A:22:ILE:C 1:A:23:ARG:N 1:A:23:ARG:CA 1:A:23:ARG:C 5 2.16 (1,546) 1:A:120:VAL:N 1:A:120:VAL:CA 1:A:120:VAL:CB 1:A:149:THR:C 5 2.15 (1,155) 1:A:148:ARG:C 1:A:149:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:C 5 2.15 (1,230) 1:A:15:ALA:N 1:A:15:ALA:CA 1:A:15:ALA:C 1:A:16:PRO:N 4 2.14 (1,364) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 13 2.13 (1,76) 1:A:75:PHE:N 1:A:75:PHE:CA 1:A:75:PHE:C 1:A:40:HIS:C 1:A:41:ASP:N 9 2.12 (1,464) 1:A:89:THR:N 1:A:289:THR:CA 1:A:40:HIS:C 1:A:41:ASP:N 9 2.12 (1,50) 1:A:40:HIS:N 1:A:40:HIS:CA 1:A:40:HIS:C 1:A:41	(1,150)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:C	1:A:134:ILE:N	17	2.18
(1,362) 1:A:55:GLY:N 1:A:55:GLY:CA 1:A:55:GLY:C 1:A:56:PRO:N 16 2.16 (1,23) 1:A:22:ILE:C 1:A:23:ARG:N 1:A:23:ARG:CA 1:A:23:ARG:C 5 2.16 (1,546) 1:A:120:VAL:N 1:A:120:VAL:CA 1:A:120:VAL:CB 1:A:120:VAL:CG1 6 2.15 (1,155) 1:A:148:ARG:C 1:A:149:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:C 5 2.15 (1,230) 1:A:15:ALA:N 1:A:15:ALA:CA 1:A:15:ALA:C 1:A:16:PRO:N 4 2.14 (1,464) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 13 2.13 (1,364) 1:A:56:PRO:N 1:A:56:PRO:CA 1:A:56:PRO:C 1:A:57:PRO:N 18 2.13 (1,50) 1:A:40:HIS:N 1:A:40:HIS:CA 1:A:40:HIS:C 1:A:44:HSP:N 9 2.12 (1,464) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 9 2.1 (1,27) 1:A:42:HR:C 1:A:25:GLN:N 1:A:25:GLN:C 1:A:49:SFR:C 2.09 <th< td=""><td>(1,72)</td><td>1:A:71:VAL:N</td><td>1:A:71:VAL:CA</td><td>1:A:71:VAL:C</td><td>1:A:72:GLU:N</td><td>16</td><td>2.17</td></th<>	(1,72)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	16	2.17
(1,23) 1:A:22:ILE:C 1:A:23:ARG:N 1:A:23:ARG:CA 1:A:23:ARG:C 5 2.16 (1,546) 1:A:120:VAL:N 1:A:120:VAL:CA 1:A:120:VAL:CB 1:A:120:VAL:CG1 6 2.15 (1,155) 1:A:148:ARG:C 1:A:149:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:C 5 2.15 (1,230) 1:A:15:ALA:N 1:A:15:ALA:CA 1:A:15:ALA:C 1:A:16:PRO:N 4 2.14 (1,464) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 13 2.13 (1,364) 1:A:56:PRO:N 1:A:56:PRO:CA 1:A:56:PRO:C 1:A:57:PRO:N 18 2.13 (1,76) 1:A:75:PHE:N 1:A:75:PHE:CA 1:A:40:HIS:C <	(1,629)	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	19	2.16
(1,546) 1:A:120:VAL:N 1:A:120:VAL:CA 1:A:120:VAL:CB 1:A:120:VAL:CG1 6 2.15 (1,155) 1:A:148:ARG:C 1:A:149:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:C 5 2.15 (1,230) 1:A:15:ALA:N 1:A:15:ALA:CA 1:A:15:ALA:C 1:A:16:PRO:N 4 2.14 (1,464) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 13 2.13 (1,364) 1:A:56:PRO:N 1:A:56:PRO:CA 1:A:56:PRO:C 1:A:57:PRO:N 18 2.13 (1,76) 1:A:75:PHE:N 1:A:75:PHE:CA 1:A:40:HIS:C 1:A:40:HIS:C 1:A:41:ASP:N 9 2.12 (1,50) 1:A:40:HIS:N 1:A:40:HIS:CA 1:A:40:HIS:C 1:A:41:ASP:N 9 2.12 (1,464) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 9 2.1 (1,27) 1:A:24:THR:C 1:A:25:GLN:N 1:A:25:GLN:C 2.0 2.09 (1,364) 1:A:394:SER:N 1:A:494:SER:CA 1:A:494:SER:C 1:A:495:GLY:N 2 </td <td>(1,362)</td> <td>1:A:55:GLY:N</td> <td>1:A:55:GLY:CA</td> <td>1:A:55:GLY:C</td> <td>1:A:56:PRO:N</td> <td>16</td> <td>2.16</td>	(1,362)	1:A:55:GLY:N	1:A:55:GLY:CA	1:A:55:GLY:C	1:A:56:PRO:N	16	2.16
(1,155) 1:A:148:ARG:C 1:A:149:THR:N 1:A:149:THR:CA 1:A:149:THR:C 5 2.15 (1,230) 1:A:15:ALA:N 1:A:15:ALA:CA 1:A:15:ALA:C 1:A:16:PRO:N 4 2.14 (1,464) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 13 2.13 (1,364) 1:A:56:PRO:N 1:A:56:PRO:CA 1:A:56:PRO:C 1:A:57:PHE:N 18 2.13 (1,76) 1:A:75:PHE:N 1:A:75:PHE:CA 1:A:75:PHE:C 1:A:76:PRO:N 18 2.12 (1,50) 1:A:40:HIS:N 1:A:40:HIS:CA 1:A:40:HIS:C 1:A:41:ASP:N 9 2.12 (1,464) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 9 2.1 (1,27) 1:A:24:THR:C 1:A:25:GLN:N 1:A:25:GLN:CA 1:A:45:FPRO:N 2 2.08 (1,364) 1:A:56:PRO:N 1:A:56:PRO:CA 1:A:56:PRO:C 1:A:56:PRO:C 1:A:56:PRO:C 2.03 (1,364) 1:A:94:SER:N 1:A:94:SER:CA 1:A:94:SER:C 1:A:95:GLY:N 2<	(1,23)	1:A:22:ILE:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	5	2.16
(1,230) 1:A:15:ALA:N 1:A:15:ALA:CA 1:A:15:ALA:C 1:A:16:PRO:N 4 2.14 (1,464) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 13 2.13 (1,364) 1:A:56:PRO:N 1:A:56:PRO:CA 1:A:56:PRO:C 1:A:57:PRO:N 18 2.13 (1,76) 1:A:75:PHE:N 1:A:75:PHE:CA 1:A:75:PHE:C 1:A:76:PRO:N 18 2.12 (1,50) 1:A:40:HIS:N 1:A:40:HIS:CA 1:A:40:HIS:C 1:A:41:ASP:N 9 2.12 (1,464) 1:A:49:HIS:N 1:A:40:HIS:CA 1:A:40:HIS:C 1:A:41:ASP:N 9 2.12 (1,464) 1:A:40:HIS:N 1:A:40:HIS:CA 1:A:40:HIS:C 1:A:41:ASP:N 9 2.12 (1,464) 1:A:40:HIS:N 1:A:40:HIS:CA 1:A:40:HIS:C 1:A:41:ASP:THR:OG1 9 2.1 (1,27) 1:A:24:THR:C 1:A:25:GLN:N 1:A:25:GLN:C 20 2.09 (1,364) 1:A:56:PRO:N 1:A:45:6:PRO:C 1:A:45:57:PRO:N 2 2.08 (1,88)	(1,546)	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:CB	1:A:120:VAL:CG1	6	2.15
(1,464) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 13 2.13 (1,364) 1:A:56:PRO:N 1:A:56:PRO:CA 1:A:56:PRO:C 1:A:57:PRO:N 18 2.13 (1,76) 1:A:75:PHE:N 1:A:75:PHE:CA 1:A:75:PHE:C 1:A:76:PRO:N 18 2.12 (1,50) 1:A:40:HIS:N 1:A:40:HIS:CA 1:A:40:HIS:C 1:A:41:ASP:N 9 2.12 (1,464) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 9 2.1 (1,27) 1:A:24:THR:C 1:A:25:GLN:N 1:A:25:GLN:CA 1:A:25:GLN:C 20 2.09 (1,364) 1:A:56:PRO:N 1:A:56:PRO:CA 1:A:56:PRO:C 1:A:57:PRO:N 2 2.08 (1,88) 1:A:94:SER:N 1:A:94:SER:CA 1:A:94:SER:C 1:A:95:GLY:N 2 2.07 (1,134) 1:A:123:ASN:N 1:A:123:ASN:CA 1:A:124:GLY:N 14 2.07 (1,73) 1:A:72:GLU:C 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:89:THR:OG1 11 2.06 (1,464)	(1,155)	1:A:148:ARG:C	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:C	5	2.15
(1,364) 1:A:56:PRO:N 1:A:56:PRO:CA 1:A:56:PRO:C 1:A:57:PRO:N 18 2.13 (1,76) 1:A:75:PHE:N 1:A:75:PHE:CA 1:A:75:PHE:C 1:A:76:PRO:N 18 2.12 (1,50) 1:A:40:HIS:N 1:A:40:HIS:CA 1:A:40:HIS:C 1:A:41:ASP:N 9 2.12 (1,464) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 9 2.1 (1,27) 1:A:24:THR:C 1:A:25:GLN:N 1:A:25:GLN:CA 1:A:25:GLN:C 20 2.09 (1,364) 1:A:56:PRO:N 1:A:56:PRO:CA 1:A:56:PRO:C 1:A:57:PRO:N 2 2.08 (1,364) 1:A:494:SER:N 1:A:494:SER:CA 1:A:56:PRO:C 1:A:57:PRO:N 2 2.08 (1,38) 1:A:94:SER:N 1:A:94:SER:CA 1:A:94:SER:C 1:A:95:GLY:N 2 2.07 (1,134) 1:A:123:ASN:N 1:A:123:ASN:CA 1:A:123:ASN:C 1:A:124:GLY:N 14 2.07 (1,73) 1:A:72:GLU:C 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1<	(1,230)	1:A:15:ALA:N	1:A:15:ALA:CA	1:A:15:ALA:C	1:A:16:PRO:N	4	2.14
(1,364) 1:A:56:PRO:N 1:A:56:PRO:CA 1:A:56:PRO:C 1:A:57:PRO:N 18 2.13 (1,76) 1:A:75:PHE:N 1:A:75:PHE:CA 1:A:75:PHE:C 1:A:76:PRO:N 18 2.12 (1,50) 1:A:40:HIS:N 1:A:40:HIS:CA 1:A:40:HIS:C 1:A:41:ASP:N 9 2.12 (1,464) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 9 2.1 (1,27) 1:A:24:THR:C 1:A:25:GLN:N 1:A:25:GLN:CA 1:A:25:GLN:C 20 2.09 (1,364) 1:A:56:PRO:N 1:A:56:PRO:CA 1:A:56:PRO:C 1:A:57:PRO:N 2 2.08 (1,88) 1:A:94:SER:N 1:A:94:SER:CA 1:A:94:SER:C 1:A:95:GLY:N 2 2.07 (1,134) 1:A:123:ASN:N 1:A:123:ASN:CA 1:A:123:ASN:C 1:A:124:GLY:N 14 2.07 (1,73) 1:A:72:GLU:C 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 11 2.06 (1,77) 1:A:76:PRO:C 1:A:77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:C <td>(1,464)</td> <td>1:A:89:THR:N</td> <td>1:A:89:THR:CA</td> <td>1:A:89:THR:CB</td> <td>1:A:89:THR:OG1</td> <td>13</td> <td>2.13</td>	(1,464)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	13	2.13
(1,50) 1:A:40:HIS:N 1:A:40:HIS:CA 1:A:40:HIS:C 1:A:41:ASP:N 9 2.12 (1,464) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 9 2.1 (1,27) 1:A:24:THR:C 1:A:25:GLN:N 1:A:25:GLN:CA 1:A:25:GLN:C 20 2.09 (1,364) 1:A:56:PRO:N 1:A:56:PRO:CA 1:A:56:PRO:C 1:A:57:PRO:N 2 2.08 (1,88) 1:A:94:SER:N 1:A:94:SER:CA 1:A:94:SER:C 1:A:95:GLY:N 2 2.07 (1,134) 1:A:123:ASN:N 1:A:123:ASN:CA 1:A:123:ASN:C 1:A:124:GLY:N 14 2.07 (1,73) 1:A:72:GLU:C 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 11 2.06 (1,464) 1:A:89:THR:N 1:A:77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:89:THR:OG1 11 2.03 (1,475) 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:CB 1:A:92:THR:OG1 20 2.03 (1,104) 1:A:106:TYR:N 1:A:106:TYR:N 1:A:10	-	1:A:56:PRO:N	1:A:56:PRO:CA	1:A:56:PRO:C	1:A:57:PRO:N	18	2.13
(1,464) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 9 2.1 (1,27) 1:A:24:THR:C 1:A:25:GLN:N 1:A:25:GLN:CA 1:A:25:GLN:C 20 2.09 (1,364) 1:A:56:PRO:N 1:A:56:PRO:CA 1:A:56:PRO:C 1:A:57:PRO:N 2 2.08 (1,88) 1:A:94:SER:N 1:A:94:SER:CA 1:A:94:SER:C 1:A:95:GLY:N 2 2.07 (1,134) 1:A:123:ASN:N 1:A:123:ASN:CA 1:A:123:ASN:C 1:A:124:GLY:N 14 2.07 (1,73) 1:A:72:GLU:C 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 11 2.06 (1,464) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 11 2.06 (1,77) 1:A:76:PRO:C 1:A:77:VAL:N 1:A:92:THR:CB 1:A:92:THR:OG1 20 2.03 (1,475) 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:CB 1:A:92:THR:OG1 20 2.03 (1,104) 1:A:106:TYR:N 1:A:106:TYR:C 1:	(1,76)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	1:A:76:PRO:N	18	2.12
(1,27) 1:A:24:THR:C 1:A:25:GLN:N 1:A:25:GLN:CA 1:A:25:GLN:C 20 2.09 (1,364) 1:A:56:PRO:N 1:A:56:PRO:CA 1:A:56:PRO:C 1:A:57:PRO:N 2 2.08 (1,88) 1:A:94:SER:N 1:A:94:SER:CA 1:A:94:SER:C 1:A:95:GLY:N 2 2.07 (1,134) 1:A:123:ASN:N 1:A:123:ASN:CA 1:A:123:ASN:C 1:A:124:GLY:N 14 2.07 (1,73) 1:A:72:GLU:C 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 11 2.06 (1,464) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 11 2.06 (1,77) 1:A:76:PRO:C 1:A:77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:C 14 2.03 (1,475) 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:CB 1:A:92:THR:OG1 20 2.03 (1,104) 1:A:106:TYR:N 1:A:106:TYR:C 1:A:106:TYR:C 1:A:106:TYR:C 8 2.03 (1,103) 1:A:105:PRO:C 1:A:106:TYR:N 1:A:106:TYR:C 1:A	(1,50)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	9	2.12
(1,27) 1:A:24:THR:C 1:A:25:GLN:N 1:A:25:GLN:CA 1:A:25:GLN:C 20 2.09 (1,364) 1:A:56:PRO:N 1:A:56:PRO:CA 1:A:56:PRO:C 1:A:57:PRO:N 2 2.08 (1,88) 1:A:94:SER:N 1:A:94:SER:CA 1:A:94:SER:C 1:A:95:GLY:N 2 2.07 (1,134) 1:A:123:ASN:N 1:A:123:ASN:CA 1:A:123:ASN:C 1:A:124:GLY:N 14 2.07 (1,73) 1:A:72:GLU:C 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 18 2.06 (1,464) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 11 2.06 (1,77) 1:A:76:PRO:C 1:A:77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:C 14 2.03 (1,475) 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:CB 1:A:92:THR:OG1 20 2.03 (1,104) 1:A:106:TYR:N 1:A:106:TYR:C 1:A:106:TYR:C 1:A:106:TYR:C 8 2.03 (1,103) 1:A:105:PRO:C 1:A:106:TYR:N 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:CA 1:A	(1,464)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	9	2.1
(1,88) 1:A:94:SER:N 1:A:94:SER:CA 1:A:94:SER:C 1:A:95:GLY:N 2 2.07 (1,134) 1:A:123:ASN:N 1:A:123:ASN:CA 1:A:123:ASN:C 1:A:124:GLY:N 14 2.07 (1,73) 1:A:72:GLU:C 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:CB 1:A:73:PHE:C 18 2.06 (1,464) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 11 2.06 (1,77) 1:A:76:PRO:C 1:A:77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:C 14 2.03 (1,475) 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:CB 1:A:92:THR:OG1 20 2.03 (1,104) 1:A:106:TYR:N 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:CA </td <td>-</td> <td>1:A:24:THR:C</td> <td>1:A:25:GLN:N</td> <td>1:A:25:GLN:CA</td> <td>1:A:25:GLN:C</td> <td>20</td> <td>2.09</td>	-	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:C	20	2.09
(1,134) 1:A:123:ASN:N 1:A:123:ASN:CA 1:A:123:ASN:C 1:A:124:GLY:N 14 2.07 (1,73) 1:A:72:GLU:C 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:CB 1:A:89:THR:OG1 11 2.06 (1,464) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 11 2.06 (1,77) 1:A:76:PRO:C 1:A:77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:C 14 2.03 (1,475) 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:CB 1:A:92:THR:OG1 20 2.03 (1,104) 1:A:106:TYR:N 1:A:106:TYR:C 1:A:107:GLY:N 18 2.03 (1,103) 1:A:105:PRO:C 1:A:106:TYR:N 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:C 8 2.03	(1,364)	1:A:56:PRO:N	1:A:56:PRO:CA	1:A:56:PRO:C	1:A:57:PRO:N	2	2.08
(1,73) 1:A:72:GLU:C 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 18 2.06 (1,464) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 11 2.06 (1,77) 1:A:76:PRO:C 1:A:77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:C 14 2.03 (1,475) 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:CB 1:A:92:THR:OG1 20 2.03 (1,104) 1:A:106:TYR:N 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:C 1:A:107:GLY:N 18 2.03 (1,103) 1:A:105:PRO:C 1:A:106:TYR:N 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:C 8 2.03	(1,88)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	2	2.07
(1,464) 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CB 1:A:89:THR:OG1 11 2.06 (1,77) 1:A:76:PRO:C 1:A:77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:C 14 2.03 (1,475) 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:CB 1:A:92:THR:OG1 20 2.03 (1,104) 1:A:106:TYR:N 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:C 1:A:107:GLY:N 18 2.03 (1,103) 1:A:105:PRO:C 1:A:106:TYR:N 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:C 8 2.03	(1,134)	1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:CA	1:A:123:ASN:C	1:A:124:GLY:N	14	2.07
(1,77) 1:A:76:PRO:C 1:A:77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:C 14 2.03 (1,475) 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:CB 1:A:92:THR:OG1 20 2.03 (1,104) 1:A:106:TYR:N 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:C 1:A:107:GLY:N 18 2.03 (1,103) 1:A:105:PRO:C 1:A:106:TYR:N 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:C 8 2.03	(1,73)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:C	18	2.06
(1,77) 1:A:76:PRO:C 1:A:77:VAL:N 1:A:77:VAL:CA 1:A:77:VAL:C 14 2.03 (1,475) 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:CB 1:A:92:THR:OG1 20 2.03 (1,104) 1:A:106:TYR:N 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:CA 2.03 (1,103) 1:A:105:PRO:C 1:A:106:TYR:N 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:C 8 2.03	· · /				1:A:89:THR:OG1		
(1,475) 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:CB 1:A:92:THR:OG1 20 2.03 (1,104) 1:A:106:TYR:N 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:C 1:A:107:GLY:N 18 2.03 (1,103) 1:A:105:PRO:C 1:A:106:TYR:N 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:C 8 2.03	` ' /		1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C		2.03
(1,104) 1:A:106:TYR:N 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:C 1:A:107:GLY:N 18 2.03 (1,103) 1:A:105:PRO:C 1:A:106:TYR:N 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:C 8 2.03	· · /						
(1,103) 1:A:105:PRO:C 1:A:106:TYR:N 1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:C 8 2.03	` ′						
	, , ,						
(1,00) 1:A:40:H15:N 1:A:40:H15:CA 1:A:40:H15:C 1:A:41:A5P:N 4 2.02	· · /	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	4	2.02
(1,406) 1:A:71:VAL:N 1:A:71:VAL:CA 1:A:71:VAL:CB 1:A:71:VAL:CG1 12 2.02	/						
	(1,104) (1,103) (1,50)	1:A:106:TYR:N 1:A:105:PRO:C 1:A:40:HIS:N	1:A:106:TYR:CA 1:A:106:TYR:N 1:A:40:HIS:CA	1:A:106:TYR:C 1:A:106:TYR:CA 1:A:40:HIS:C	1:A:107:GLY:N 1:A:106:TYR:C 1:A:41:ASP:N	18 8 4	2.03 2.03 2.02



	ed from previous pag					7.7. 1
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,73)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:C	15	2.01
(1,122)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:C	1:A:118:LYS:N	14	2.0
(1,197)	1:A:6:GLN:N	1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:C	1:A:7:PHE:N	19	1.97
(1,23)	1:A:22:ILE:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	20	1.96
(1,52)	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:C	1:A:52:SER:N	16	1.95
(1,23)	1:A:22:ILE:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	7	1.95
(1,607)	1:A:139:PRO:N	1:A:139:PRO:CA	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	1	1.92
(1,355)	1:A:52:SER:N	1:A:52:SER:CA	1:A:52:SER:C	1:A:53:PRO:N	2	1.91
(1,104)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	16	1.91
(1,55)	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	16	1.89
(1,606)	1:A:138:ASN:N	1:A:138:ASN:CA	1:A:138:ASN:C	1:A:139:PRO:N	6	1.88
(1,2)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	1:A:9:CYS:N	15	1.88
(1,88)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	4	1.87
(1,148)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:C	1:A:133:GLU:N	11	1.87
(1,73)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:C	13	1.85
(1,103)	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	3	1.85
(1,629)	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	1:A:145:ASP:CA	1:A:145:ASP:C	20	1.84
(1,23)	1:A:22:ILE:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	4	1.84
(1,134)	1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:CA	1:A:123:ASN:C	1:A:124:GLY:N	4	1.83
(1,464)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	16	1.81
(1,34)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:C	1:A:32:GLY:N	18	1.81
(1,546)	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:CB	1:A:120:VAL:CG1	19	1.79
(1,155)	1:A:148:ARG:C	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:C	3	1.79
(1,74)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:C	1:A:74:GLY:N	18	1.77
(1,104)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	17	1.77
(1,48)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:C	1:A:40:HIS:N	11	1.75
(1,67)	1:A:68:THR:C	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	13	1.74
(1,393)	1:A:65:SER:C	1:A:66:ALA:N	1:A:66:ALA:CA	1:A:66:ALA:C	4	1.73
(1,105)	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:C	20	1.72
(1,33)	1:A:30:GLU:C	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:C	13	1.71
(1,367)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:CB	1:A:58:PHE:CG	14	1.7
(1,75)	1:A:74:GLY:C	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	6	1.69
(1,148)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:C	1:A:133:GLU:N	18	1.69
(1,140) $(1,89)$	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	3	1.67
(1,66)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:C	1:A:69:PHE:N	10	1.67
(1,00) $(1,428)$	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:CB	1:A:78:GLU:CG	18	1.67
(1,128)	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:C	1:A:121:ASP:N	19	1.67
(1,123) $(1,144)$	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	1:A:131:ALA:N	1	1.66
· · /	1:A:56:PRO:N	1:A:56:PRO:CA	1:A:56:PRO:C	1:A:57:PRO:N	12	1.64
(1,364) $(1,98)$	1:A:30:PKO:N 1:A:101:LEU:N	1:A:30:PKO:CA 1:A:101:LEU:CA	1:A:30:PKO:C 1:A:101:LEU:C	1:A:37:PRO:N 1:A:102:TYR:N		1.63
(' /	1:A:101:LEU:N 1:A:20:LEU:N	1:A:101:LEU:CA 1:A:20:LEU:CA	1:A:101:LEU:C 1:A:20:LEU:C	1:A:102:1 Y R:N 1:A:21:LEU:N	10	1.63
(1,18)	1:A:20:LEU:N 1:A:108:GLU:C			1:A:21:LEU:N 1:A:109:ILE:C	18	
(1,105)	1:A:108:GLU:C 1:A:104:GLY:N	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA 1:A:104:GLY:C		4	1.63
(1,502)		1:A:104:GLY:CA		1:A:105:PRO:N	8	1.62
(1,46)	1:A:38:GLY:N	1:A:38:GLY:CA	1:A:38:GLY:C	1:A:39:TYR:N	10	1.62
(1,131)	1:A:121:ASP:C	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:C	14	1.61
(1,364)	1:A:56:PRO:N	1:A:56:PRO:CA	1:A:56:PRO:C	1:A:57:PRO:N	1	1.6
(1,23)	1:A:22:ILE:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	13	1.6
(1,102)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:C	1:A:104:GLY:N	17	1.6
(1,159)	1:A:150:ARG:C	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:C	1	1.59
(1,148)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:C	1:A:133:GLU:N	9	1.59
(1,61)	1:A:60:ARG:C	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:C	19	1.58



Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,172)	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	1:A:3:PHE:N	11	1.58
(1,141)	1:A:126:ASP:C	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:C	1	1.56
(1,154)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:C	1:A:149:THR:N	9	1.55
(1,144)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	1:A:131:ALA:N	6	1.55
(1,131)	1:A:121:ASP:C	1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:CA	1:A:122:ASP:C	17	1.55
(1,101)	1:A:102:TYR:C	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:C	4	1.55
(1,50)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	13	1.53
(1,49)	1:A:39:TYR:C	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:C	1	1.52
(1,25)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	17	1.52
(1,103)	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	19	1.52
(1,502)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	17	1.51
(1,138)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:C	1:A:126:ASP:N	18	1.51
(1,123)	1:A:117:MET:C	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:C	1	1.5
(1,103)	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	17	1.5
(1,609)	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	1:A:140:ALA:CA	1:A:140:ALA:C	7	1.49
(1,530) $(1,52)$	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:C	1:A:52:SER:N	20	1.49
(1,63)	1:A:61:TYR:C	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:C	16	1.48
(1,49)	1:A:39:TYR:C	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:C	20	1.48
(1,364)	1:A:56:PRO:N	1:A:56:PRO:CA	1:A:56:PRO:C	1:A:57:PRO:N	14	1.48
(1,304) $(1,103)$	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	2	1.48
(1,103) $(1,104)$	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	8	1.47
(1,104) $(1,49)$	1:A:39:TYR:C	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:C	6	1.45
(1,43) $(1,71)$	1:A:70:GLU:C	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:C	8	1.44
(1,680)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	7	1.44
(1,080) $(1,58)$	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	1:A:60:ARG:N	5	1.44
(1,55) $(1,55)$	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	2	1.44
(1,33) $(1,22)$	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:C	1:A:23:ARG:N	11	1.44
(1,364)	1:A:56:PRO:N	1:A:56:PRO:CA	1:A:56:PRO:C	1:A:57:PRO:N	8	1.43
(1,304) $(1,159)$	1:A:150:ARG:C	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:C	19	1.43
(1,166)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:C	1:A:69:PHE:N	20	1.42
(1,58)	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	1:A:60:ARG:N	7	1.42
(1,38) $(1,170)$	1:A:1:MET:C	1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:CA	1:A:2:ASP:C	20	1.42
(1,170) $(1,88)$	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	16	1.39
(1,63) $(1,63)$	1:A:61:TYR:C	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:C	2	1.39
(1,03) $(1,57)$	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	4	1.37
(1,37) $(1,142)$	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	11	1.36
(1,142) $(1,103)$	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	20	1.36
(1,103) $(1,48)$	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:100:11R:CA 1:A:39:TYR:C	1:A:40:HIS:N	7	1.35
(, ,						
(1,122)	1:A:117:MET:N 1:A:39:TYR:C	1:A:117:MET:CA 1:A:40:HIS:N	1:A:117:MET:C 1:A:40:HIS:CA	1:A:118:LYS:N 1:A:40:HIS:C	4	1.34 1.33
(1,49)					4	
(1,112)	1:A:112:VAL:N 1:A:88:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:C	1:A:113:TYR:N 1:A:89:THR:N	11	1.33
(1,80)		1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C		11	1.32
(1,364)	1:A:56:PRO:N	1:A:56:PRO:CA	1:A:56:PRO:C	1:A:57:PRO:N	19	1.32
(1,25)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	9	1.32
(1,48)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:C	1:A:40:HIS:N	15	1.31
(1,230)	1:A:15:ALA:N	1:A:15:ALA:CA	1:A:15:ALA:C	1:A:16:PRO:N	1	1.31
(1,104)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	12	1.31
(1,105)	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:C	7	1.3
(1,68)	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:GLU:N	15	1.29
(1,675)	1:A:155:LEU:C	1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CA	1:A:156:HIS:C	8	1.29
(1,623)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	4	1.29



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,112)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:C	1:A:113:TYR:N	2	1.29
(1,57)	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	1	1.27
(1,5)	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	18	1.26
(1,49)	1:A:39:TYR:C	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:C	10	1.26
(1,129)	1:A:120:VAL:C	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:C	2	1.26
(1,108)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:C	1:A:111:ALA:N	18	1.26
(1,104)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	3	1.26
(1,54)	1:A:52:SER:N	1:A:52:SER:CA	1:A:52:SER:C	1:A:53:PRO:N	8	1.25
(1,26)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLN:N	9	1.25
(1,150)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:C	1:A:134:ILE:N	15	1.25
(1,71)	1:A:70:GLU:C	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:C	14	1.24
(1,181)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	17	1.24
(1,80)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:THR:N	17	1.23
(1,134)	1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:CA	1:A:123:ASN:C	1:A:124:GLY:N	17	1.22
(1,36)	1:A:33:SER:N	1:A:33:SER:CA	1:A:33:SER:C	1:A:34:LEU:N	3	1.21
(1,145)	1:A:130:GLU:C	1:A:131:ALA:N	1:A:131:ALA:CA	1:A:131:ALA:C	19	1.2
(1,112)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:C	1:A:113:TYR:N	14	1.19
(1,389)	1:A:64:MET:C	1:A:65:SER:N	1:A:65:SER:CA	1:A:65:SER:C	1	1.18
(1,127)	1:A:119:TRP:C	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:C	19	1.18
(1,85)	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	9	1.17
(1,152)	1:A:134:ILE:N	1:A:134:ILE:CA	1:A:134:ILE:C	1:A:135:TYR:N	8	1.17
(1,119)	1:A:115:ALA:C	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:C	14	1.17
(1,24)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	12	1.16
(1,546)	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:CB	1:A:120:VAL:CG1	15	1.15
(1,143)	1:A:129:GLY:C	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	8	1.15
(1,141)	1:A:126:ASP:C	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:C	6	1.15
(1,104)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	15	1.15
(1,502)	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1:A:105:PRO:N	2	1.14
(1,160)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:C	1:A:152:SER:N	16	1.14
(1,105)	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:C	9	1.14
(1,77)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C	7	1.13
(1,76)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	1:A:76:PRO:N	16	1.13
(1,523)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	15	1.13
(1,5)	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	20	1.13
(1,162)	1:A:152:SER:N	1:A:152:SER:CA	1:A:152:SER:C	1:A:153:LEU:N	7	1.13
(1,161)	1:A:151:VAL:C	1:A:152:SER:N	1:A:152:SER:CA	1:A:152:SER:C	14	1.12
(1,66)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:C	1:A:69:PHE:N	7	1.11
(1,55)	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	18	1.11
(1,77)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C	3	1.09
(1,67)	1:A:68:THR:C	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	5	1.09
(1,475)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:CB	1:A:92:THR:OG1	19	1.09
(1,127)	1:A:119:TRP:C	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:C	14	1.09
(1,24)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	1	1.07
(1,104)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	13	1.07
(1,77)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C	12	1.06
(1,138)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:C	1:A:126:ASP:N	20	1.06
(1,135) $(1,125)$	1:A:118:LYS:C	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:C	17	1.06
(1,147)	1:A:131:ALA:C	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:C	2	1.05
(1,147) $(1,123)$	1:A:117:MET:C	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:C	2	1.05
(1,123) $(1,34)$	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:C	1:A:32:GLY:N	13	1.04
(1,159)	1:A:150:ARG:C	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:C	12	1.04
(1,100)	1.71.100.AIG.C	1.11.191. VAL.IN	1.11.101. VAL.UA	1.11.101. VAL.O		1.04



	ed from previous pag		A	A / A	N (1 1	T 7* 1 4* ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,71)	1:A:70:GLU:C	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:C	7	1.03
(1,520)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:CB	1:A:110:GLU:CG	8	1.03
(1,85)	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	7	1.02
(1,54)	1:A:52:SER:N	1:A:52:SER:CA	1:A:52:SER:C	1:A:53:PRO:N	18	1.02
(1,103)	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	11	1.02
(1,1)	1:A:7:PHE:C	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	20	1.02
(1,58)	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	1:A:60:ARG:N	13	0.99
(1,27)	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:C	6	0.99
(1,26)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLN:N	4	0.99
(1,137)	1:A:124:GLY:C	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:C	4	0.99
(1,150)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:C	1:A:134:ILE:N	19	0.98
(1,270)	1:A:28:MET:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	2	0.97
(1,60)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:C	1:A:61:TYR:N	16	0.96
(1,464)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	14	0.96
(1,104)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	7	0.96
(1,46)	1:A:38:GLY:N	1:A:38:GLY:CA	1:A:38:GLY:C	1:A:39:TYR:N	12	0.95
(1,364)	1:A:56:PRO:N	1:A:56:PRO:CA	1:A:56:PRO:C	1:A:57:PRO:N	7	0.95
(1,22)	1:A:22:ILE:N	1:A:22:ILE:CA	1:A:22:ILE:C	1:A:23:ARG:N	16	0.95
(1,159)	1:A:150:ARG:C	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:C	9	0.95
(1,112)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:C	1:A:113:TYR:N	19	0.95
(1,50)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	12	0.94
(1,123)	1:A:117:MET:C	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:C	6	0.94
(1,108)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:C	1:A:111:ALA:N	14	0.93
(1,103)	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	14	0.93
(1,111)	1:A:111:ALA:C	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:C	4	0.92
(1,153)	1:A:147:LEU:C	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:C	9	0.9
(1,88)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	12	0.89
(1,26)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLN:N	19	0.89
(1,24)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	10	0.89
(1,144)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	1:A:131:ALA:N	17	0.89
(1,120)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:C	1:A:117:MET:N	5	0.89
(1,47)	1:A:38:GLY:C	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:C	15	0.88
(1,144)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	1:A:131:ALA:N	16	0.88
(1,67)	1:A:68:THR:C	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	8	0.86
(1,5)	1:A:10:GLU:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	3	0.86
(1,46)	1:A:38:GLY:N	1:A:38:GLY:CA	1:A:38:GLY:C	1:A:39:TYR:N	16	0.86
(1,141)	1:A:126:ASP:C	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:C	16	0.86
(1,138)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:C	1:A:126:ASP:N	11	0.86
(1,103)	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	16	0.86
(1,105)	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:C	14	0.85
(1,67)	1:A:68:THR:C	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	18	0.84
(1,55)	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	20	0.84
(1,104)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	1	0.84
(1,103)	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	1	0.84
(1,188)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:C	1:A:40:HIS:N	17	0.83
(1,10) $(1,91)$	1:A:97:ALA:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	18	0.82
(1,8)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:C	1:A:13:GLU:N	18	0.82
(1,142)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	12	0.82
(1,142) $(1,142)$	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	14	0.82
(1,142) $(1,77)$	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C	6	0.82
(1,17) $(1,128)$	1:A:120:VAL:N	1:A:120:VAL:CA	1:A:120:VAL:C	1:A:121:ASP:N	17	0.81
(1,140)	1.11.120. VAL.IV	1.11.120. VIII.OA	1.11.120. VAL.O	1.71.121.7101 .11		0.01



Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,104)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	9	0.81
(1,104) $(1,82)$	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	7	0.8
(1,52) $(1,52)$	1:A:51:LYS:N	1:A:51:LYS:CA	1:A:51:LYS:C	1:A:52:SER:N	18	0.8
(1,140)	1:A:126:ASP:N	1:A:126:ASP:CA	1:A:126:ASP:C	1:A:127:LEU:N	20	0.8
(1,63)	1:A:61:TYR:C	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:C	14	0.79
(1,146)	1:A:131:ALA:N	1:A:131:ALA:CA	1:A:131:ALA:C	1:A:132:TYR:N	1	0.79
(1,140) $(1,154)$	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:C	1:A:149:THR:N	13	0.78
(1,104) $(1,91)$	1:A:97:ALA:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	15	0.77
(1,85)	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	2	0.76
(1,134)	1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:CA	1:A:123:ASN:C	1:A:124:GLY:N	1	0.76
(1,194) $(1,59)$	1:A:59:ALA:C	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:C	18	0.75
(1,135)	1:A:123:ASN:C	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	18	0.75
(1,133) $(1,23)$	1:A:22:ILE:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	3	0.74
(1,161)	1:A:151:VAL:C	1:A:152:SER:N	1:A:152:SER:CA	1:A:152:SER:C	15	0.74
(1,101) $(1,121)$	1:A:116:LEU:C	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:C	14	0.74
(1,121) $(1,68)$	1:A:69:PHE:N	1:A:69:PHE:CA	1:A:69:PHE:C	1:A:70:GLU:N	18	0.74
(1,55)	1:A:57:PRO:C	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	7	0.73
(1,33) $(1,33)$	1:A:30:GLU:C	1:A:30:FHE:N 1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:C	14	0.73
(1,33) $(1,25)$	1:A:23:ARG:C	1:A:31:LEU:N 1:A:24:THR:N	1:A:31:LEU:CA 1:A:24:THR:CA	1:A:31:LEU:C 1:A:24:THR:C	11	0.73
(1,25) $(1,155)$	1:A:148:ARG:C	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:C	15	0.73
(1,106)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:C	1:A:110:GLU:N	9	0.73
(1,100) $(1,546)$	1:A:109:ILE:N 1:A:120:VAL:N	1:A:109:ILE:CA 1:A:120:VAL:CA	1:A:109:ILE:C 1:A:120:VAL:CB	1:A:110:GLU:N 1:A:120:VAL:CG1	11	0.73
(' /	1:A:92:THR:N	1:A:120:VAL:CA 1:A:92:THR:CA	1:A:120:VAL:CB 1:A:92:THR:CB	1:A:120:VAL:CG1 1:A:92:THR:OG1	10	0.72
(1,475)			1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:C	5	0.72
(1,27)	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLN:N			18	
(1,103)	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C		0.72
(1,58)	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	1:A:60:ARG:N	18	0.71
(1,147)	1:A:131:ALA:C	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:C	16	0.71
(1,140)	1:A:126:ASP:N	1:A:126:ASP:CA	1:A:126:ASP:C	1:A:127:LEU:N	12	0.71
(1,77)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C	9	0.7
(1,2)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	1:A:9:CYS:N	12	0.7
(1,135)	1:A:123:ASN:C	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	7	0.7
(1,135)	1:A:123:ASN:C	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	8	0.7
(1,133)	1:A:122:ASP:C	1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:CA	1:A:123:ASN:C	1	0.7
(1,625)	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	1:A:144:PRO:N	8	0.69
(1,49)	1:A:39:TYR:C	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:C	5	0.69
(1,144)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	1:A:131:ALA:N	4	0.69
(1,607)	1:A:139:PRO:N	1:A:139:PRO:CA	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	19	0.68
(1,126)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:C	1:A:120:VAL:N	3	0.68
(1,103)	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	13	0.68
(1,48)	1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CA	1:A:39:TYR:C	1:A:40:HIS:N	2	0.67
(1,24)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	18	0.67
(1,108)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:C	1:A:111:ALA:N	3	0.67
(1,72)	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:C	1:A:72:GLU:N	7	0.66
(1,56)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ALA:N	2	0.66
(1,112)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:C	1:A:113:TYR:N	15	0.66
(1,108)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:C	1:A:111:ALA:N	19	0.66
(1,104)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	14	0.66
(1,49)	1:A:39:TYR:C	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:C	9	0.65
(1,85)	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	20	0.64
(1,364)	1:A:56:PRO:N	1:A:56:PRO:CA	1:A:56:PRO:C	1:A:57:PRO:N	17	0.64
(1,153)	1:A:147:LEU:C	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:C	14	0.64



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,144)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	1:A:131:ALA:N	10	0.64
(1,104)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	6	0.64
(1,75)	1:A:74:GLY:C	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	14	0.63
(1,74)	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:C	1:A:74:GLY:N	19	0.63
(1,50)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	6	0.63
(1,147)	1:A:131:ALA:C	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:C	3	0.63
(1,139)	1:A:125:PHE:C	1:A:126:ASP:N	1:A:126:ASP:CA	1:A:126:ASP:C	13	0.63
(1,85)	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	12	0.62
(1,58)	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	1:A:60:ARG:N	12	0.62
(1,126)	1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CA	1:A:119:TRP:C	1:A:120:VAL:N	18	0.62
(1,85)	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	13	0.61
(1,141)	1:A:126:ASP:C	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:C	12	0.61
(1,140)	1:A:126:ASP:N	1:A:126:ASP:CA	1:A:126:ASP:C	1:A:127:LEU:N	10	0.61
(1,102)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:C	1:A:104:GLY:N	12	0.61
(1,89)	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	12	0.6
(1,372)	1:A:60:ARG:N	1:A:60:ARG:CA	1:A:60:ARG:CB	1:A:60:ARG:CG	14	0.6
(1,161)	1:A:151:VAL:C	1:A:152:SER:N	1:A:152:SER:CA	1:A:152:SER:C	5	0.6
(1,155)	1:A:148:ARG:C	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:C	6	0.6
(1,122)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:C	1:A:118:LYS:N	20	0.6
(1,76)	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	1:A:76:PRO:N	12	0.59
(1,36)	1:A:33:SER:N	1:A:33:SER:CA	1:A:33:SER:C	1:A:34:LEU:N	6	0.59
(1,143)	1:A:129:GLY:C	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	14	0.59
(1,118)	1:A:115:ALA:N	1:A:115:ALA:CA	1:A:115:ALA:C	1:A:116:LEU:N	1	0.59
(1,36)	1:A:33:SER:N	1:A:33:SER:CA	1:A:33:SER:C	1:A:34:LEU:N	15	0.58
(1,147)	1:A:131:ALA:C	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:C	10	0.58
(1,129)	1:A:120:VAL:C	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:C	17	0.58
(1,104)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	20	0.58
(1,1)	1:A:7:PHE:C	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	10	0.58
(1,77)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C	2	0.57
(1,26)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLN:N	11	0.57
(1,181)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	19	0.57
(1,464)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:CB	1:A:89:THR:OG1	4	0.56
(1,26)	1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLN:N	7	0.56
(1,103)	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	4	0.56
(1,9)	1:A:12:LYS:C	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:C	18	0.55
(1,77)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C	10	0.55
(1,158)	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:C	1:A:151:VAL:N	17	0.55
(1,148)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:C	1:A:133:GLU:N	5	0.55
(1,122)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:C	1:A:118:LYS:N	7	0.55
(1,66)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:C	1:A:69:PHE:N	17	0.54
(1,18)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:C	1:A:21:LEU:N	17	0.54
(1,146)	1:A:131:ALA:N	1:A:131:ALA:CA	1:A:131:ALA:C	1:A:132:TYR:N	11	0.54
(1,85)	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	11	0.53
(1,85) $(1,85)$	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	18	0.53
(1,87)	1:A:93:PRO:C	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	13	0.52
(1,6)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	1:A:12:LYS:N	14	0.52
(1,0) $(1,223)$	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	18	0.52
(1,154)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:C	1:A:149:THR:N	16	0.52
(1,104) $(1,50)$	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	18	0.52
(1,30) $(1,144)$	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	1:A:131:ALA:N	12	0.51
(1,135)	1:A:123:ASN:C	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	4	0.51
(1,100)	1.71.120.71011.0	1.11.124.GD1.IV	1.11.124.GD1.OA	1.11.124.GET.O		0.01



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,106)	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:C	1:A:110:GLU:N	3	0.51
(1,90)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:ALA:N	10	0.5
(1,62)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:C	1:A:62:PHE:N	20	0.5
(1,598)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ASP:N	1:A:137:ASP:CA	1:A:137:ASP:C	16	0.5
(1,35)	1:A:32:GLY:C	1:A:33:SER:N	1:A:33:SER:CA	1:A:33:SER:C	5	0.5
(1,148)	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:C	1:A:133:GLU:N	14	0.5
(1,105)	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:C	16	0.5
(1,33)	1:A:30:GLU:C	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:C	18	0.49
(1,134)	1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:CA	1:A:123:ASN:C	1:A:124:GLY:N	18	0.49
(1,105)	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:C	15	0.49
(1,73)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:C	3	0.48
(1,71)	1:A:70:GLU:C	1:A:71:VAL:N	1:A:71:VAL:CA	1:A:71:VAL:C	1	0.48
(1,58)	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	1:A:60:ARG:N	1	0.48
(1,43)	1:A:36:GLU:C	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	13	0.48
(1,147)	1:A:131:ALA:C	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:C	12	0.48
(1,34)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:C	1:A:32:GLY:N	4	0.47
(1,9)	1:A:12:LYS:C	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:C	17	0.46
(1,34)	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:C	1:A:32:GLY:N	5	0.46
(1,136)	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	1:A:125:PHE:N	2	0.46
(1,103)	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	15	0.46
(1,58)	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	1:A:60:ARG:N	15	0.45
(1,23)	1:A:22:ILE:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1	0.45
(1,112)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:C	1:A:113:TYR:N	1	0.45
(1,108)	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:C	1:A:111:ALA:N	8	0.45
(1,105)	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:C	8	0.45
(1,94)	1:A:99:SER:N	1:A:99:SER:CA	1:A:99:SER:C	1:A:100:SER:N	11	0.44
(1,680)	1:A:156:HIS:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	9	0.44
(1,64)	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:C	1:A:63:GLY:N	12	0.44
(1,50)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	17	0.44
(1,159)	1:A:150:ARG:C	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:C	13	0.44
(1,103)	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	10	0.44
(1,66)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:C	1:A:69:PHE:N	9	0.43
(1,33)	1:A:30:GLU:C	1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CA	1:A:31:LEU:C	5	0.43
(1,10)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:C	1:A:14:LEU:N	1	0.43
(1,607)	1:A:139:PRO:N	1:A:139:PRO:CA	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	10	0.42
(1,438)	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLU:N	14	0.42
(1,27)	1:A:24:THR:C	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:C	12	0.42
(1,150)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:C	1:A:134:ILE:N	1	0.42
(1,135)	1:A:123:ASN:C	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	11	0.42
(1,107)	1:A:109:ILE:C	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:C	14	0.42
(1,93)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:SER:N	1:A:99:SER:CA	1:A:99:SER:C	8	0.41
(1,54)	1:A:52:SER:N	1:A:52:SER:CA	1:A:52:SER:C	1:A:53:PRO:N	17	0.41
(1,476)	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	1:A:93:PRO:N	20	0.41
(1,112)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:C	1:A:113:TYR:N	16	0.41
(1,82)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	17	0.4
(1,02) $(1,7)$	1:A:11:LEU:C	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:C	15	0.4
(1,626)	1:A:144:PRO:N	1:A:144:PRO:CA	1:A:144:PRO:C	1:A:145:ASP:N	5	0.4
(1,020) $(1,2)$	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	1:A:9:CYS:N	8	0.4
(1,10)	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:C	1:A:14:LEU:N	12	0.4
(1,37)	1:A:33:SER:C	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:C	13	0.39
(1,116)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:C	1:A:115:ALA:N	6	0.39
(1,110)	1.71.1111.7101 .11	1.21.111.7101.071	1.71.71 1.7101 .0	1.11.110.1111111		od on next nage



(1,93) 1-A.998.ALAC	Key	$rac{d\ from\ previous\ pag}{{f Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,91)	(1,93)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:SER:N	1:A:99:SER:CA	1:A:99:SER:C	10	0.38
(1,77)	` /	1:A:97:ALA:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	8	0.38
(1.58)	(1,77)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C	11	0.38
(1,548)	(1,62)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:C	1:A:62:PHE:N	10	0.38
(1,143) 1.A;129;GLY;C 1.A;130;GLU;C 1.A;130;GLU;C 13 0.38 (1,102) 1.A;130;GLU;C 1.A;103;GLU;C 1.A;103;GLU;	(1,6)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	1:A:12:LYS:N	19	0.38
(1,143)	(' /	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	1:A:60:ARG:N	6	0.38
(1,90)	/	1:A:129:GLY:C	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	13	0.38
(1,66)	(1,102)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:C	1:A:104:GLY:N	13	0.38
(1,66)	(1,90)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:ALA:N	3	0.37
(1,235)	/	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:C	1:A:69:PHE:N	6	0.37
(1,141)	(1,66)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:C	1:A:69:PHE:N	12	0.37
(1,144)	(' /	1:A:17:VAL:N	1:A:17:VAL:CA	1:A:17:VAL:CB	1:A:17:VAL:CG1	17	
(1,129)	` ' /	1:A:126:ASP:C	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:C	17	0.37
(1,129)	(/ /	1:A:123:ASN:N	1:A:123:ASN:CA	1:A:123:ASN:C	1:A:124:GLY:N	5	
(1,94)	· · /	1:A:120:VAL:C	1:A:121:ASP:N	1:A:121:ASP:CA	1:A:121:ASP:C		
(1,79)	\ /	1:A:99:SER:N	1:A:99:SER:CA	1:A:99:SER:C	1:A:100:SER:N	17	0.36
(1,476)	/				1:A:88:VAL:C		
(1,230)	/						
(1,111) 1:A:111:ALA:C 1:A:112:VAL:N 1:A:112:VAL:CA 1:A:112:VAL:C 14 0.35 (1,2) 1:A:8:VAL:N 1:A:33:SER:N 1:A:33:SER:CA 1:A:33:SER:C 1:A:34:LEU:N 1 0.33 (1,36) 1:A:33:SER:N 1:A:33:SER:CA 1:A:33:SER:C 1:A:34:LEU:N 1 0.33 (1,36) 1:A:33:SER:N 1:A:33:SER:CA 1:A:33:SER:C 1:A:34:LEU:N 1 0.33 (1,158) 1:A:150:ARG:N 1:A:150:ARG:CA 1:A:150:ARG:C 1:A:151:VAL:N 15 0.33 (1,108) 1:A:110:GLU:N 1:A:110:GLU:CA 1:A:111:ALA:N 6 0.33 (1,88) 1:A:49:SER:N 1:A:49:SER:CA 1:A:49:SER:C 1:A:49:SER:C 1:A:40:SERY:N 19 0.32 (1,60) 1:A:36:STHR:N 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:C 1:A:69:PHE:N 14 0.32 (1,20) 1:A:21:LEU:N 1:A:21:LEU:CA 1:A:133:GLU:C 1:A:133:GLU:C 1:A:133:GLU:C 1:A:133:GLU:C 1:A:133:GLU:C 1:A:133:GLU:C 1:A:133:GLU:C 1:A:133:GLU:C 1:	· · /						
(1,2) 1:A:8:VAL:N 1:A:8:VAL:CA 1:A:8:VAL:C 1:A:9:CYS:N 6 0.34 (1,36) 1:A:33:SER:N 1:A:33:SER:CA 1:A:33:SER:C 1:A:34:LEU:N 1 0.33 (1,36) 1:A:33:SER:N 1:A:33:SER:CA 1:A:33:SER:C 1:A:34:LEU:N 19 0.33 (1,158) 1:A:15:A:15:ARG:N 1:A:15:A:15:ARG:CA 1:A:15:A:15:ARG:C 1:A:34:LEU:N 15 0.33 (1,108) 1:A:10:GLU:N 1:A:10:GLU:CA 1:A:110:GLU:C 1:A:111:ALA:N 6 0.33 (1,108) 1:A:10:GLU:N 1:A:14:D:GLU:CA 1:A:110:GLU:C 1:A:111:ALA:N 6 0.33 (1,88) 1:A:94:SER:N 1:A:94:SER:C 1:A:94:SER:C 1:A:69:PHE:N 19 0.32 (1,60) 1:A:68:THR:N 1:A:408:THR:N 1:A:68:THR:C 1:A:68:THR:C 1:A:68:THR:D 1:A:09:PHE:N 14 0.32 (1,20) 1:A:21:LEU:N 1:A:21:LEU:CA 1:A:13:GLU:C 1:A:13:GLU:C 1:A:13:GLU:C 1:A:13:GLU:C 1:A:13:GLU:C 1:A:13:GLU:C 1:A:13:GLU:C 1:A:13	\ /						
(1,36) 1:A:33:SER:N 1:A:33:SER:CA 1:A:33:SER:C 1:A:34:LEU:N 1 0.33 (1,36) 1:A:33:SER:N 1:A:33:SER:CA 1:A:33:SER:C 1:A:34:LEU:N 19 0.33 (1,158) 1:A:150:ARG:N 1:A:150:ARG:CA 1:A:150:ARG:C 1:A:34:LEU:N 15 0.33 (1,108) 1:A:110:GLU:N 1:A:110:GLU:CA 1:A:110:GLU:CA 1:A:111:ALA:N 6 0.33 (1,88) 1:A:94:SER:N 1:A:94:SER:CA 1:A:94:SER:C 1:A:95:GLY:N 19 0.32 (1,66) 1:A:68:THR:N 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:C 1:A:69:PHE:N 14 0.32 (1,20) 1:A:21:LEU:N 1:A:21:LEU:CA 1:A:13:GLU:C 1:A:13:GLU:EN 9 0.32 (1,112) 1:A:131:LEU:CA 1:A:112:VAL:C 1:A:131:TYR:N 5 0.32 (1,135) 1:A:13:GLU:N 1:A:124:GLY:C 1:A:131:GLU:C 1:A:31:LEU:C 1:A:31:LEU:C 9 0.31 (1,135) 1:A:13:GLU:N 1:A:124:GLY:CA 1:A:124:GLY:C 9 0.31	/						
(1,36) 1:A:33:SER:N 1:A:33:SER:CA 1:A:33:SER:C 1:A:34:LEU:N 19 0.33 (1,158) 1:A:150:ARG:N 1:A:150:ARG:CA 1:A:150:ARG:C 1:A:151:VAL:N 15 0.33 (1,108) 1:A:110:GLU:N 1:A:110:GLU:CA 1:A:110:GLU:C 1:A:111:ALA:N 6 0.33 (1,88) 1:A:94:SER:N 1:A:94:SER:CC 1:A:95:GLY:N 19 0.32 (1,66) 1:A:68:THR:N 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:C 1:A:69:PHE:N 14 0.32 (1,20) 1:A:21:LEU:N 1:A:21:LEU:CA 1:A:31:LEU:C 1:A:33:GLU:C 1:A:313:GLU:C 0.32 (1,112) 1:A:112:VAL:N 1:A:31:LEU:CA 1:A:31:LEU:C 1:A:133:GLU:C 1:A:133:GLU:C 1:A:133:GLU:C 1:A:133:GLU:C 1:A:133:GLU:C 1:A:133:GLU:C 9 0.31 (1,101) 1:A:13:GLU:N 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:C 1:A:14:LEU:C 1 1:A:14:LEU:N 18 0.31 (1,53) 1:A:59:GLU:C 1:A:15:LU:C 1:A:14:LEU:C 18 0.3 (1,53	(' /						
(1,158) 1:A:150:ARG:N 1:A:150:ARG:CA 1:A:150:ARG:C 1:A:151:VAL:N 15 0.33 (1,108) 1:A:110:GLU:N 1:A:110:GLU:CA 1:A:110:GLU:C 1:A:111:ALA:N 6 0.33 (1,88) 1:A:94:SER:N 1:A:94:SER:CA 1:A:94:SER:CC 1:A:111:ALA:N 19 0.32 (1,66) 1:A:68:THR:N 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:C 1:A:68:THR:C 1:A:69:PHE:N 14 0.32 (1,20) 1:A:21:LEU:N 1:A:21:LEU:CA 1:A:21:LEU:C 1:A:22:ILE:N 9 0.32 (1,150) 1:A:133:GLU:N 1:A:133:GLU:CA 1:A:1312:VAL:C 1:A:134:ILE:N 6 0.32 (1,121) 1:A:112:VAL:N 1:A:121:VAL:CA 1:A:112:VAL:C 1:A:133:GLU:N 1 0.31 (1,135) 1:A:33:ASN:C 1:A:124:GLY:N 1:A:124:GLY:CA 1:A:124:GLY:C 9 0.31 (1,100) 1:A:13:GLU:N 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:CA 1:A:14:GLY:C 9 0.31 (1,50) 1:A:45:90:GLY:C <	/						
(1,108) 1:A:110:GLU:N 1:A:110:GLU:CA 1:A:110:GLU:C 1:A:111:ALA:N 6 0.33 (1,88) 1:A:94:SER:N 1:A:94:SER:CA 1:A:94:SER:C 1:A:95:GLY:N 19 0.32 (1,66) 1:A:68:THR:N 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:C 1:A:69:FHE:N 14 0.32 (1,20) 1:A:12:LEU:N 1:A:12:LEU:CA 1:A:21:LEU:C 1:A:22:LLE:N 9 0.32 (1,150) 1:A:31:GU:N 1:A:133:GLU:CA 1:A:133:GLU:C 1:A:133:HEN 6 0.32 (1,112) 1:A:112:VAL:N 1:A:112:VAL:CA 1:A:112:VAL:C 1:A:113:TYR:N 5 0.32 (1,34) 1:A:31:LEU:N 1:A:31:LEU:CA 1:A:31:LEU:C 1:A:32:GLY:N 10 0.31 (1,34) 1:A:13:GLU:N 1:A:31:LEU:CA 1:A:13:GLU:CA 1:A:124:GLY:CA 1:A:124:GLY:C 9 0.31 (1,100) 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:CA 1:A:49:LEU:N 18 0.31 (1,56) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ALA:	/						
(1,88) 1:A:94:SER:N 1:A:94:SER:CA 1:A:94:SER:C 1:A:95:GLY:N 19 0.32 (1,66) 1:A:68:THR:N 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:C 1:A:69:PHE:N 14 0.32 (1,20) 1:A:21:LEU:N 1:A:21:LEU:CA 1:A:21:LEU:C 1:A:22:ILE:N 9 0.32 (1,150) 1:A:13:3:GLU:N 1:A:131:CEU:CA 1:A:131:GLU:C 1:A:134:ILE:N 6 0.32 (1,112) 1:A:112:VAL:N 1:A:112:VAL:CA 1:A:112:VAL:C 1:A:134:ILE:N 5 0.32 (1,34) 1:A:112:VAL:N 1:A:124:GLY:CA 1:A:112:VAL:C 1:A:134:ILEY:C 9 0.31 (1,135) 1:A:123:ASN:C 1:A:124:GLY:N 1:A:124:GLY:CA 1:A:131:ILEY:C 9 0.31 (1,10) 1:A:13:GLU:N 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:CA 1:A:14:EU:N 18 0.31 (1,56) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:CA 1:A:59:ALA:N 7 0.3 (1,140) 1:A:	· · /						
(1,66) 1:A:68:THR:N 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:C 1:A:69:PHE:N 14 0.32 (1,20) 1:A:21:LEU:N 1:A:21:LEU:CA 1:A:21:LEU:C 1:A:22:ILE:N 9 0.32 (1,150) 1:A:133:GLU:N 1:A:133:GLU:CA 1:A:133:GLU:C 1:A:134:ILE:N 6 0.32 (1,112) 1:A:112:VAL:N 1:A:112:VAL:CA 1:A:112:VAL:C 1:A:131:TYR:N 5 0.32 (1,34) 1:A:112:VAL:N 1:A:112:VAL:CA 1:A:112:VAL:C 1:A:131:TYR:N 5 0.32 (1,34) 1:A:123:ASN:C 1:A:124:GLY:CA 1:A:13:LEU:C 1:A:124:GLY:C 9 0.31 (1,10) 1:A:13:GLU:N 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:C 1:A:14:LEU:N 18 0.31 (1,83) 1:A:90:GLY:C 1:A:91:LEU:N 1:A:91:LEU:CA 1:A:491:LEU:CA 1:A:491:LEU:C 18 0.3 (1,56) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ALA:N 7 0.3 (1,36) 1:A:151:VAL:C 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:V	(/ /						
(1,20) 1:A:21:LEU:N 1:A:21:LEU:CA 1:A:21:LEU:C 1:A:22:ILE:N 9 0.32 (1,150) 1:A:133:GLU:N 1:A:133:GLU:CA 1:A:133:GLU:C 1:A:134:ILE:N 6 0.32 (1,150) 1:A:12:VAL:N 1:A:133:GLU:CA 1:A:132:VAL:C 1:A:131:TYR:N 5 0.32 (1,34) 1:A:31:LEU:N 1:A:31:LEU:CA 1:A:31:LEU:C 1:A:32:GLY:N 10 0.31 (1,135) 1:A:123:ASN:C 1:A:124:GLY:N 1:A:124:GLY:CA 1:A:124:GLY:C 9 0.31 (1,10) 1:A:13:GLU:N 1:A:124:GLY:N 1:A:124:GLY:CA 1:A:124:GLY:C 9 0.31 (1,10) 1:A:13:GLU:N 1:A:124:GLY:CA 1:A:124:GLY:C 9 0.31 (1,10) 1:A:13:GLU:N 1:A:124:GLY:N 1:A:13:GLU:C 1:A:14:LEU:N 18 0.31 (1,10) 1:A:13:GLU:N 1:A:13:GLU:C 1:A:13:GLU:C 1:A:34:LEU:N 18 0.31 (1,56) 1:A:35:PHE:N 1:A:459:LACA 1:A:52:SER:CA 1:A:459:LACN 7 0.3	/						
(1,150) 1:A:133:GLU:N 1:A:133:GLU:CA 1:A:133:GLU:C 1:A:134:ILE:N 6 0.32 (1,112) 1:A:112:VAL:N 1:A:112:VAL:CA 1:A:112:VAL:C 1:A:131:TYR:N 5 0.32 (1,34) 1:A:31:LEU:N 1:A:31:LEU:CA 1:A:31:LEU:C 1:A:32:GLY:N 10 0.31 (1,135) 1:A:123:ASN:C 1:A:124:GLY:N 1:A:124:GLY:CA 1:A:124:GLY:C 9 0.31 (1,10) 1:A:13:GLU:N 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:C 1:A:14:LEU:N 18 0.31 (1,83) 1:A:90:GLY:C 1:A:19:LEU:N 1:A:91:LEU:CA 1:A:49:LEU:C 18 0.3 (1,56) 1:A:58:PHE:N 1:A:59:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ALA:N 7 0.3 (1,53) 1:A:51:LYS:C 1:A:52:SER:N 1:A:52:SER:CA 1:A:55:SER:C 13 0.3 (1,50) 1:A:151:VAL:N 1:A:123:ASN:CA 1:A:152:SER:CA 1:A:152:SER:C 13 0.3 (1,140) 1:A:130:GLU:C 1:A:133:SER:CA 1:A:150:AR:C 1:A:14:GLY:N 2	' '						
(1,112) 1:A:112:VAL:N 1:A:112:VAL:CA 1:A:112:VAL:C 1:A:113:TYR:N 5 0.32 (1,34) 1:A:31:LEU:N 1:A:31:LEU:CA 1:A:31:LEU:C 1:A:32:GLY:N 10 0.31 (1,135) 1:A:123:ASN:C 1:A:124:GLY:N 1:A:124:GLY:CA 1:A:124:GLY:C 9 0.31 (1,10) 1:A:13:GLU:N 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:C 1:A:14:LEU:N 18 0.31 (1,83) 1:A:90:GLY:C 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:CA 1:A:391:LEU:C 18 0.3 (1,56) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:59:ALA:N 7 0.3 (1,56) 1:A:55:PHE:N 1:A:52:SER:N 1:A:55:PHE:CA 1:A:59:ALA:N 7 0.3 (1,56) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CA 1:A:59:ALA:N 7 0.3 (1,53) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:CA 1:A:152:SER:N 4 0.3 (1,143) 1:A:131:ALA:N 1:A:131:ALA:CA 1:A:132:GLY:N 2 0.3	(' /						
(1,34) 1:A:31:LEU:N 1:A:31:LEU:CA 1:A:31:LEU:C 1:A:32:GLY:N 10 0.31 (1,135) 1:A:123:ASN:C 1:A:124:GLY:N 1:A:124:GLY:CA 1:A:124:GLY:C 9 0.31 (1,10) 1:A:13:GLU:N 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:C 1:A:14:LEU:N 18 0.31 (1,83) 1:A:90:GLY:C 1:A:91:LEU:N 1:A:59:LEU:CA 1:A:491:LEU:C 18 0.3 (1,56) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:59:ALA:N 7 0.3 (1,53) 1:A:51:LYS:C 1:A:52:SER:N 1:A:52:SER:CA 1:A:52:SER:CA 1:A:52:SER:CA 1:A:52:SER:CA 1:A:52:SER:CA 1:A:52:SER:N 4 0.3 (1,160) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:C 1:A:152:SER:N 4 0.3 (1,134) 1:A:123:ASN:N 1:A:123:ASN:C 1:A:123:ASN:C 1:A:123:ASN:C 1:A:123:ASN:C 1:A:131:ALA:C 10 0.29 (1,36) 1:A:33:SER:N 1:A:33:SER:CA 1:A:33:SER:C 1:A:131:ALA:C 10 0.29 (1,45	(/ /						
(1,135) 1:A:123:ASN:C 1:A:124:GLY:N 1:A:124:GLY:CA 1:A:124:GLY:C 9 0.31 (1,10) 1:A:13:GLU:N 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:C 1:A:14:LEU:N 18 0.31 (1,83) 1:A:90:GLY:C 1:A:91:LEU:N 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:C 18 0.3 (1,56) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:59:ALA:N 7 0.3 (1,53) 1:A:51:LYS:C 1:A:52:SER:N 1:A:52:SER:CA 1:A:52:SER:C 13 0.3 (1,160) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:C 1:A:152:SER:N 4 0.3 (1,160) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:C 1:A:152:SER:N 4 0.3 (1,160) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:131:ALA:C 1:A:1424:GLY:N 2 0.3 (1,160) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:131:ALA:C 1:A:1424:GLY:N 2 0.3 (1,161) 1:A:33:SER:N 1:A:33:SER:CA 1:A:133:ALA:CA 1:A:134:LEU:N 18 0.29 </td <td>(' /</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>	(' /						
(1,10) 1:A:13:GLU:N 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:C 1:A:14:LEU:N 18 0.31 (1,83) 1:A:90:GLY:C 1:A:91:LEU:N 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:C 18 0.3 (1,56) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:59:ALA:N 7 0.3 (1,53) 1:A:51:LYS:C 1:A:52:SER:N 1:A:52:SER:CA 1:A:52:SER:C 13 0.3 (1,160) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:C 1:A:152:SER:N 4 0.3 (1,134) 1:A:123:ASN:N 1:A:123:ASN:CA 1:A:123:ASN:C 1:A:124:GLY:N 2 0.3 (1,58) 1:A:59:ALA:N 1:A:59:ALA:CA 1:A:60:ARG:N 20 0.29 (1,36) 1:A:33:SER:N 1:A:33:SER:CA 1:A:33:SER:C 1:A:434:LEU:N 18 0.29 (1,445) 1:A:130:GLU:C 1:A:131:ALA:N 1:A:131:ALA:CA 1:A:131:ALA:C 20 0.29 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:68:THR:CA 1:A:81:VAL:C 1:A:469:PHE:N 17 0.28 (1,438)	· · /	1:A:123:ASN:C	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	9	
(1,83) 1:A:90:GLY:C 1:A:91:LEU:N 1:A:91:LEU:CA 1:A:91:LEU:C 18 0.3 (1,56) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ALA:N 7 0.3 (1,53) 1:A:51:LYS:C 1:A:52:SER:N 1:A:52:SER:CA 1:A:52:SER:C 13 0.3 (1,160) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:C 1:A:152:SER:N 4 0.3 (1,134) 1:A:123:ASN:N 1:A:123:ASN:CA 1:A:123:ASN:C 1:A:124:GLY:N 2 0.3 (1,58) 1:A:59:ALA:N 1:A:59:ALA:CA 1:A:59:ALA:C 1:A:60:ARG:N 20 0.29 (1,36) 1:A:33:SER:N 1:A:33:SER:CA 1:A:33:SER:C 1:A:34:LEU:N 18 0.29 (1,445) 1:A:130:GLU:C 1:A:131:ALA:N 1:A:131:ALA:CA 1:A:131:ALA:C 20 0.29 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 17 0.28 (1,438) 1:A:81:VAL:N 1:A:81:VAL:CA 1:A:81:VAL:C 1:A:89:PHE:N 19	` ' /		1:A:13:GLU:CA				
(1,56) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ALA:N 7 0.3 (1,53) 1:A:51:LYS:C 1:A:52:SER:N 1:A:52:SER:CA 1:A:52:SER:C 13 0.3 (1,160) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:C 1:A:152:SER:N 4 0.3 (1,134) 1:A:123:ASN:N 1:A:123:ASN:CA 1:A:123:ASN:C 1:A:124:GLY:N 2 0.3 (1,58) 1:A:59:ALA:N 1:A:59:ALA:CA 1:A:59:ALA:C 1:A:60:ARG:N 20 0.29 (1,36) 1:A:59:ALA:N 1:A:33:SER:CA 1:A:33:SER:C 1:A:434:LEU:N 18 0.29 (1,36) 1:A:33:GLU:C 1:A:131:ALA:N 1:A:131:ALA:CA 1:A:34:LEU:N 18 0.29 (1,145) 1:A:130:GLU:C 1:A:131:ALA:N 1:A:131:ALA:CA 1:A:131:ALA:C 20 0.29 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 17 0.28 (1,438) 1:A:81:VAL:N 1:A:81:VAL:CA 1:A:81:VAL:C 1:A:82:GLU:N 8	· · /	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:C	18	
(1,53) 1:A:51:LYS:C 1:A:52:SER:N 1:A:52:SER:CA 1:A:52:SER:C 13 0.3 (1,160) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:C 1:A:152:SER:N 4 0.3 (1,134) 1:A:123:ASN:N 1:A:123:ASN:CA 1:A:123:ASN:C 1:A:124:GLY:N 2 0.3 (1,58) 1:A:59:ALA:N 1:A:59:ALA:CA 1:A:59:ALA:C 1:A:60:ARG:N 20 0.29 (1,36) 1:A:33:SER:N 1:A:33:SER:CA 1:A:33:SER:C 1:A:34:LEU:N 18 0.29 (1,145) 1:A:130:GLU:C 1:A:131:ALA:N 1:A:131:ALA:CA 1:A:131:ALA:C 20 0.29 (1,74) 1:A:130:GLU:C 1:A:131:ALA:N 1:A:73:PHE:C 1:A:73:PHE:C 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 17 0.28 (1,438) 1:A:81:VAL:N 1:A:81:VAL:CA 1:A:81:VAL:C 1:A:82:GLU:N 8 0.28 (1,466) 1:A:68:THR:N 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:C 1:A:69:PHE:N 19 0.27 (1,161) 1:A:19:ALB:CA 1:A:152:SER:N 1:A:152:SE	· · /	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ALA:N	7	0.3
(1,160) 1:A:151:VAL:N 1:A:151:VAL:CA 1:A:151:VAL:C 1:A:152:SER:N 4 0.3 (1,134) 1:A:123:ASN:N 1:A:123:ASN:CA 1:A:123:ASN:C 1:A:124:GLY:N 2 0.3 (1,58) 1:A:59:ALA:N 1:A:59:ALA:CA 1:A:59:ALA:C 1:A:60:ARG:N 20 0.29 (1,36) 1:A:33:SER:N 1:A:33:SER:CA 1:A:33:SER:C 1:A:34:LEU:N 18 0.29 (1,445) 1:A:130:GLU:C 1:A:131:ALA:N 1:A:131:ALA:CA 1:A:131:ALA:C 20 0.29 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 17 0.28 (1,438) 1:A:81:VAL:N 1:A:81:VAL:CA 1:A:81:VAL:C 1:A:82:GLU:N 8 0.28 (1,466) 1:A:68:THR:N 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:C 1:A:69:PHE:N 19 0.27 (1,17) 1:A:19:ALA:C 1:A:20:LEU:CA 1:A:159:ALA:C 1:A:159:ALA:C 1:A:159:ALA:C 1:A:133:GLU:C 1:A:133:GLU:C 1:A:133:GLU:C 1:A:133:GLU:C 1:A:134:ILE:N 12 0.27						13	
(1,134) 1:A:123:ASN:N 1:A:123:ASN:CA 1:A:123:ASN:C 1:A:124:GLY:N 2 0.3 (1,58) 1:A:59:ALA:N 1:A:59:ALA:CA 1:A:59:ALA:C 1:A:60:ARG:N 20 0.29 (1,36) 1:A:33:SER:N 1:A:33:SER:CA 1:A:33:SER:C 1:A:34:LEU:N 18 0.29 (1,145) 1:A:130:GLU:C 1:A:131:ALA:N 1:A:131:ALA:CA 1:A:131:ALA:C 20 0.29 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 17 0.28 (1,438) 1:A:81:VAL:N 1:A:81:VAL:CA 1:A:81:VAL:C 1:A:82:GLU:N 8 0.28 (1,66) 1:A:68:THR:N 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:C 1:A:69:PHE:N 19 0.27 (1,17) 1:A:19:ALA:C 1:A:20:LEU:N 1:A:152:SER:CA 1:A:152:SER:C 20 0.27 (1,161) 1:A:133:GLU:N 1:A:133:GLU:CA 1:A:133:GLU:C 1:A:134:ILE:N 12 0.27 (1,146) 1:A:131:ALA:N 1:A:131:ALA:CA 1:A:131:ALA:C 1:A:132:TYR:N 13 </td <td> /</td> <td>1:A:151:VAL:N</td> <td>1:A:151:VAL:CA</td> <td>1:A:151:VAL:C</td> <td>1:A:152:SER:N</td> <td>4</td> <td>0.3</td>	/	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:C	1:A:152:SER:N	4	0.3
(1,58) 1:A:59:ALA:N 1:A:59:ALA:CA 1:A:59:ALA:C 1:A:60:ARG:N 20 0.29 (1,36) 1:A:33:SER:N 1:A:33:SER:CA 1:A:33:SER:C 1:A:34:LEU:N 18 0.29 (1,145) 1:A:130:GLU:C 1:A:131:ALA:N 1:A:131:ALA:CA 1:A:131:ALA:C 20 0.29 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 17 0.28 (1,438) 1:A:81:VAL:N 1:A:81:VAL:CA 1:A:81:VAL:C 1:A:82:GLU:N 8 0.28 (1,66) 1:A:68:THR:N 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:C 1:A:69:PHE:N 19 0.27 (1,17) 1:A:19:ALA:C 1:A:20:LEU:N 1:A:20:LEU:CA 1:A:20:LEU:C 1 0.27 (1,161) 1:A:151:VAL:C 1:A:152:SER:N 1:A:152:SER:CA 1:A:152:SER:C 20 0.27 (1,150) 1:A:133:GLU:N 1:A:133:GLU:CA 1:A:133:GLU:C 1:A:133:GLU:C 1:A:131:ALA:N 1 0.27 (1,146) 1:A:131:ALA:N 1:A:131:ALA:CA 1:A:131:ALA:CA 1:A:1	· · /				1:A:124:GLY:N	2	
(1,36) 1:A:33:SER:N 1:A:33:SER:CA 1:A:33:SER:C 1:A:34:LEU:N 18 0.29 (1,145) 1:A:130:GLU:C 1:A:131:ALA:N 1:A:131:ALA:CA 1:A:131:ALA:C 20 0.29 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 17 0.28 (1,438) 1:A:81:VAL:N 1:A:81:VAL:CA 1:A:81:VAL:C 1:A:82:GLU:N 8 0.28 (1,66) 1:A:68:THR:N 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:C 1:A:69:PHE:N 19 0.27 (1,17) 1:A:19:ALA:C 1:A:20:LEU:N 1:A:20:LEU:CA 1:A:20:LEU:C 1 0.27 (1,161) 1:A:151:VAL:C 1:A:152:SER:N 1:A:152:SER:CA 1:A:152:SER:C 20 0.27 (1,150) 1:A:133:GLU:N 1:A:133:GLU:CA 1:A:133:GLU:C 1:A:134:ILE:N 12 0.27 (1,146) 1:A:131:ALA:N 1:A:131:ALA:CA 1:A:131:ALA:C 1:A:132:TYR:N 13 0.27 (1,91) 1:A:97:ALA:C 1:A:98:ALA:N 1:A:98:ALA:CA 1:A:98:ALA:C 1:A:9	\ /				1:A:60:ARG:N	20	
(1,145) 1:A:130:GLU:C 1:A:131:ALA:N 1:A:131:ALA:CA 1:A:131:ALA:C 20 0.29 (1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 17 0.28 (1,438) 1:A:81:VAL:N 1:A:81:VAL:CA 1:A:81:VAL:C 1:A:82:GLU:N 8 0.28 (1,66) 1:A:68:THR:N 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:C 1:A:69:PHE:N 19 0.27 (1,17) 1:A:19:ALA:C 1:A:20:LEU:N 1:A:20:LEU:CA 1:A:20:LEU:C 1 0.27 (1,161) 1:A:151:VAL:C 1:A:152:SER:N 1:A:152:SER:CA 1:A:152:SER:C 20 0.27 (1,150) 1:A:133:GLU:N 1:A:133:GLU:CA 1:A:133:GLU:C 1:A:134:ILE:N 12 0.27 (1,146) 1:A:131:ALA:N 1:A:131:ALA:CA 1:A:131:ALA:C 1:A:132:TYR:N 13 0.27 (1,91) 1:A:97:ALA:C 1:A:98:ALA:N 1:A:98:ALA:CA 1:A:98:ALA:C 19 0.26	` /						
(1,74) 1:A:73:PHE:N 1:A:73:PHE:CA 1:A:73:PHE:C 1:A:74:GLY:N 17 0.28 (1,438) 1:A:81:VAL:N 1:A:81:VAL:CA 1:A:81:VAL:C 1:A:82:GLU:N 8 0.28 (1,66) 1:A:68:THR:N 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:C 1:A:69:PHE:N 19 0.27 (1,17) 1:A:19:ALA:C 1:A:20:LEU:N 1:A:20:LEU:CA 1:A:20:LEU:C 1 0.27 (1,161) 1:A:151:VAL:C 1:A:152:SER:N 1:A:152:SER:CA 1:A:152:SER:C 20 0.27 (1,150) 1:A:133:GLU:N 1:A:133:GLU:CA 1:A:133:GLU:C 1:A:134:ILE:N 12 0.27 (1,146) 1:A:131:ALA:N 1:A:131:ALA:CA 1:A:131:ALA:C 1:A:132:TYR:N 13 0.27 (1,135) 1:A:123:ASN:C 1:A:124:GLY:N 1:A:124:GLY:CA 1:A:124:GLY:C 19 0.26 (1,91) 1:A:97:ALA:C 1:A:98:ALA:N 1:A:98:ALA:CA 1:A:98:ALA:CA 1:A:98:ALA:C 19 0.26	/						
(1,438) 1:A:81:VAL:N 1:A:81:VAL:CA 1:A:81:VAL:C 1:A:82:GLU:N 8 0.28 (1,66) 1:A:68:THR:N 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:C 1:A:69:PHE:N 19 0.27 (1,17) 1:A:19:ALA:C 1:A:20:LEU:N 1:A:20:LEU:CA 1:A:20:LEU:C 1 0.27 (1,161) 1:A:151:VAL:C 1:A:152:SER:N 1:A:152:SER:CA 1:A:152:SER:C 20 0.27 (1,150) 1:A:133:GLU:N 1:A:133:GLU:CA 1:A:133:GLU:C 1:A:134:ILE:N 12 0.27 (1,146) 1:A:131:ALA:N 1:A:131:ALA:CA 1:A:131:ALA:C 1:A:132:TYR:N 13 0.27 (1,135) 1:A:123:ASN:C 1:A:124:GLY:N 1:A:124:GLY:CA 1:A:124:GLY:C 19 0.26 (1,91) 1:A:97:ALA:C 1:A:98:ALA:N 1:A:98:ALA:CA 1:A:98:ALA:C 19 0.26	\ /						
(1,66) 1:A:68:THR:N 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:C 1:A:69:PHE:N 19 0.27 (1,17) 1:A:19:ALA:C 1:A:20:LEU:N 1:A:20:LEU:CA 1:A:20:LEU:C 1 0.27 (1,161) 1:A:151:VAL:C 1:A:152:SER:N 1:A:152:SER:CA 1:A:152:SER:C 20 0.27 (1,150) 1:A:133:GLU:N 1:A:133:GLU:CA 1:A:133:GLU:C 1:A:134:ILE:N 12 0.27 (1,146) 1:A:131:ALA:N 1:A:131:ALA:CA 1:A:131:ALA:C 1:A:132:TYR:N 13 0.27 (1,135) 1:A:123:ASN:C 1:A:124:GLY:N 1:A:124:GLY:CA 1:A:124:GLY:C 19 0.26 (1,91) 1:A:97:ALA:C 1:A:98:ALA:N 1:A:98:ALA:CA 1:A:98:ALA:C 19 0.26	, ,						
(1,17) 1:A:19:ALA:C 1:A:20:LEU:N 1:A:20:LEU:CA 1:A:20:LEU:C 1 0.27 (1,161) 1:A:151:VAL:C 1:A:152:SER:N 1:A:152:SER:CA 1:A:152:SER:C 20 0.27 (1,150) 1:A:133:GLU:N 1:A:133:GLU:CA 1:A:133:GLU:C 1:A:134:ILE:N 12 0.27 (1,146) 1:A:131:ALA:N 1:A:131:ALA:CA 1:A:131:ALA:C 1:A:132:TYR:N 13 0.27 (1,135) 1:A:123:ASN:C 1:A:124:GLY:N 1:A:124:GLY:CA 1:A:124:GLY:C 19 0.26 (1,91) 1:A:97:ALA:C 1:A:98:ALA:N 1:A:98:ALA:CA 1:A:98:ALA:C 19 0.26	\ /						
(1,161) 1:A:151:VAL:C 1:A:152:SER:N 1:A:152:SER:CA 1:A:152:SER:C 20 0.27 (1,150) 1:A:133:GLU:N 1:A:133:GLU:CA 1:A:133:GLU:C 1:A:134:ILE:N 12 0.27 (1,146) 1:A:131:ALA:N 1:A:131:ALA:CA 1:A:131:ALA:C 1:A:132:TYR:N 13 0.27 (1,135) 1:A:123:ASN:C 1:A:124:GLY:N 1:A:124:GLY:CA 1:A:124:GLY:C 19 0.26 (1,91) 1:A:97:ALA:C 1:A:98:ALA:N 1:A:98:ALA:CA 1:A:98:ALA:C 19 0.26	/						
(1,150) 1:A:133:GLU:N 1:A:133:GLU:CA 1:A:133:GLU:C 1:A:134:ILE:N 12 0.27 (1,146) 1:A:131:ALA:N 1:A:131:ALA:CA 1:A:131:ALA:C 1:A:132:TYR:N 13 0.27 (1,135) 1:A:123:ASN:C 1:A:124:GLY:N 1:A:124:GLY:CA 1:A:124:GLY:C 19 0.27 (1,91) 1:A:97:ALA:C 1:A:98:ALA:N 1:A:98:ALA:CA 1:A:98:ALA:C 19 0.26	/						
(1,146) 1:A:131:ALA:N 1:A:131:ALA:CA 1:A:131:ALA:C 1:A:132:TYR:N 13 0.27 (1,135) 1:A:123:ASN:C 1:A:124:GLY:N 1:A:124:GLY:CA 1:A:124:GLY:C 19 0.27 (1,91) 1:A:97:ALA:C 1:A:98:ALA:N 1:A:98:ALA:CA 1:A:98:ALA:C 19 0.26	· · /						
(1,135) 1:A:123:ASN:C 1:A:124:GLY:N 1:A:124:GLY:CA 1:A:124:GLY:C 19 0.27 (1,91) 1:A:97:ALA:C 1:A:98:ALA:N 1:A:98:ALA:CA 1:A:98:ALA:C 19 0.26	` ' /						
(1,91) 1:A:97:ALA:C 1:A:98:ALA:N 1:A:98:ALA:CA 1:A:98:ALA:C 19 0.26	` ' /						
	` ' /						
(1,87) 1:A:93:PRO:C 1:A:94:SER:N 1:A:94:SER:CA 1:A:94:SER:C 12 0.26	· · /						



	ed from previous pag		A 4	A 1	N.C. 1.1	T 7* . 1 . 4*
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,85)	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	3	0.26
(1,6)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	1:A:12:LYS:N	1	0.26
(1,37)	1:A:33:SER:C	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:C	7	0.26
(1,2)	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	1:A:9:CYS:N	14	0.26
(1,155)	1:A:148:ARG:C	1:A:149:THR:N	1:A:149:THR:CA	1:A:149:THR:C	20	0.26
(1,124)	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:C	1:A:119:TRP:N	12	0.26
(1,1)	1:A:7:PHE:C	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	9	0.26
(1,50)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	14	0.25
(1,37)	1:A:33:SER:C	1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CA	1:A:34:LEU:C	4	0.25
(1,142)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	18	0.25
(1,135)	1:A:123:ASN:C	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	10	0.25
(1,123)	1:A:117:MET:C	1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CA	1:A:118:LYS:C	15	0.25
(1,85)	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	5	0.24
(1,567)	1:A:129:GLY:N	1:A:129:GLY:CA	1:A:129:GLY:C	1:A:130:GLU:N	17	0.24
(1,89)	1:A:96:LYS:C	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	20	0.23
(1,83)	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:C	4	0.23
(1,157)	1:A:149:THR:C	1:A:150:ARG:N	1:A:150:ARG:CA	1:A:150:ARG:C	15	0.23
(1,116)	1:A:114:ASP:N	1:A:114:ASP:CA	1:A:114:ASP:C	1:A:115:ALA:N	12	0.23
(1,87)	1:A:93:PRO:C	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	8	0.22
(1,607)	1:A:139:PRO:N	1:A:139:PRO:CA	1:A:139:PRO:C	1:A:140:ALA:N	20	0.22
(1,46)	1:A:38:GLY:N	1:A:38:GLY:CA	1:A:38:GLY:C	1:A:39:TYR:N	7	0.22
(1,137)	1:A:124:GLY:C	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:C	7	0.22
(1,135)	1:A:123:ASN:C	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	3	0.22
(1,87)	1:A:93:PRO:C	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	2	0.21
(1,66)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:C	1:A:69:PHE:N	1	0.21
(1,16)	1:A:19:ALA:N	1:A:19:ALA:CA	1:A:19:ALA:C	1:A:20:LEU:N	1	0.21
(1,153)	1:A:147:LEU:C	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:C	16	0.21
(1,50)	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:C	1:A:41:ASP:N	15	0.2
(1,119)	1:A:115:ALA:C	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:C	5	0.2
(1,82)	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	1:A:90:GLY:N	1	0.19
(1,20)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	1:A:22:ILE:N	12	0.19
(1,120)	1:A:116:LEU:N	1:A:116:LEU:CA	1:A:116:LEU:C	1:A:117:MET:N	6	0.19
(1,102)	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:C	1:A:104:GLY:N	15	0.19
(1,144)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	1:A:131:ALA:N	14	0.18
(1,112)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:C	1:A:113:TYR:N	18	0.18
(1,622)	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	10	0.17
(1,142)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:C	1:A:128:SER:N	4	0.17
(1,63)	1:A:61:TYR:C	1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CA	1:A:62:PHE:C	19	0.16
(1,625)	1:A:143:ALA:N	1:A:143:ALA:CA	1:A:143:ALA:C	1:A:144:PRO:N	3	0.16
(1,46)	1:A:38:GLY:N	1:A:38:GLY:CA	1:A:38:GLY:C	1:A:39:TYR:N	5	0.16
(1,136)	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	1:A:125:PHE:N	3	0.16
(1,113)	1:A:112:VAL:C	1:A:113:TYR:N	1:A:113:TYR:CA	1:A:113:TYR:C	18	0.16
(1,104)	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	4	0.16
(1,101)	1:A:102:TYR:C	1:A:103:ILE:N	1:A:103:ILE:CA	1:A:103:ILE:C	7	0.16
(1,9)	1:A:12:LYS:C	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:C	14	0.15
(1,6)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	1:A:12:LYS:N	17	0.15
(1,20)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	1:A:22:ILE:N	8	0.15
(1,150)	1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:C	1:A:134:ILE:N	8	0.15
(1,105) $(1,105)$	1:A:108:GLU:C	1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CA	1:A:109:ILE:C	19	0.15
(1,103) $(1,104)$	1:A:106:GEC:C	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	1:A:107:GLY:N	10	0.15
(1,104) $(1,78)$	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	19	0.13
(1,10)	T.17.11. V.17T1.11	1.71.11.VIII.OA	1.71.11. VALL.	1.71.10.010.11		0.14



Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$oxed{Violation} (\circ)$
(1,73)	1:A:72:GLU:C	1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CA	1:A:73:PHE:C	9	0.14
(1,24)	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1:A:24:THR:N	4	0.14
(1,147)	1:A:131:ALA:C	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:C	20	0.14
(1,107)	1:A:109:ILE:C	1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:CA	1:A:110:GLU:C	9	0.14
(1,85)	1:A:91:LEU:C	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	8	0.13
(1,83)	1:A:90:GLY:C	1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:CA	1:A:91:LEU:C	16	0.13
(1,154)	1:A:148:ARG:N	1:A:148:ARG:CA	1:A:148:ARG:C	1:A:149:THR:N	19	0.13
(1,103)	1:A:105:PRO:C	1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CA	1:A:106:TYR:C	5	0.13
(1,49)	1:A:39:TYR:C	1:A:40:HIS:N	1:A:40:HIS:CA	1:A:40:HIS:C	16	0.12
(1,93)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:SER:N	1:A:99:SER:CA	1:A:99:SER:C	14	0.11
(1,147)	1:A:131:ALA:C	1:A:132:TYR:N	1:A:132:TYR:CA	1:A:132:TYR:C	6	0.11
(1,96)	1:A:100:SER:N	1:A:100:SER:CA	1:A:100:SER:C	1:A:101:LEU:N	8	0.08
(1,159)	1:A:150:ARG:C	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:C	8	0.08
(1,75)	1:A:74:GLY:C	1:A:75:PHE:N	1:A:75:PHE:CA	1:A:75:PHE:C	9	0.07
(1,23)	1:A:22:ILE:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	9	0.07
(1,122)	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:C	1:A:118:LYS:N	13	0.07
(1,425)	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:CB	1:A:77:VAL:CG1	18	0.06
(1,20)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	1:A:22:ILE:N	11	0.06
(1,138)	1:A:125:PHE:N	1:A:125:PHE:CA	1:A:125:PHE:C	1:A:126:ASP:N	14	0.05
(1,9)	1:A:12:LYS:C	1:A:13:GLU:N	1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:C	4	0.04
(1,437)	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:CB	1:A:81:VAL:CG1	18	0.04
(1,621)	1:A:142:THR:N	1:A:142:THR:CA	1:A:142:THR:C	1:A:143:ALA:N	16	0.03
(1,523)	1:A:112:VAL:N	1:A:112:VAL:CA	1:A:112:VAL:CB	1:A:112:VAL:CG1	2	0.03
(1,46)	1:A:38:GLY:N	1:A:38:GLY:CA	1:A:38:GLY:C	1:A:39:TYR:N	17	0.03
(1,121)	1:A:116:LEU:C	1:A:117:MET:N	1:A:117:MET:CA	1:A:117:MET:C	13	0.03
(1,91)	1:A:97:ALA:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	17	0.02
(1,77)	1:A:76:PRO:C	1:A:77:VAL:N	1:A:77:VAL:CA	1:A:77:VAL:C	18	0.02
(1,65)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:C	17	0.02
(1,136)	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	1:A:125:PHE:N	5	0.02
(1,1)	1:A:7:PHE:C	1:A:8:VAL:N	1:A:8:VAL:CA	1:A:8:VAL:C	1	0.02
(1,8)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:C	1:A:13:GLU:N	11	0.01

