

# wwPDB NMR Structure Validation Summary Report (i)

#### Apr 2, 2020 – 11:26 AM CDT

PDB ID : 6NBN

Title: Structure of Aedes aegypti OBP22 in the complex with arachidonic acid

Authors: Jones, D.N.; Wang, J.

Deposited on : 2018-12-07

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

Mogul: 1.8.0 (224370), CSD as540be (2019)

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

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

PANAV : Wang et al. (2010)

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

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

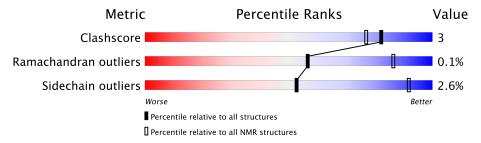
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.6.dev1

# 1 Overall quality at a glance (i)

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

The overall completeness of chemical shifts assignment is 62%.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain	
1	A	123	90%	6%



# 2 Ensemble composition and analysis (i)

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

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

Well-defined (core) protein residues						
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model			
1	A:6-A:121 (116)	0.23	1			

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

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

The models can be grouped into 4 clusters and 6 single-model clusters were found.

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



# 3 Entry composition (i)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2033 atoms, of which 1004 are hydrogens and 0 are deuteriums.

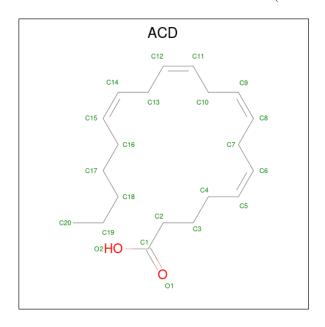
• Molecule 1 is a protein called AAEL005772-PA.

Mol	Chain	Residues	Atoms				Trace		
1	Λ	100	Total	С	Н	N	О	S	0
1 A	123	1980	633	973	170	195	9	U	

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1	MET	_	initiating methionine	UNP Q1HRL7

• Molecule 2 is ARACHIDONIC ACID (three-letter code: ACD) (formula:  $C_{20}H_{32}O_2$ ).



Mol	Chain	Residues	Atoms				
9	Λ	1	Total	С	Η	О	
2	A	1	53	20	31	2	



# 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.

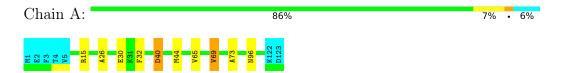
• Molecule 1: AAEL005772-PA



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

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

• Molecule 1: AAEL005772-PA





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



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

Of the 50 calculated structures, 30 were deposited, based on the following criterion: NOE violation energy.

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

Software name	Classification	Version
ARIA	structure calculation	2.3.2
CNS	structure calculation	1.2

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

Chemical shift file(s)	6nbn_nmr.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1524
Number of shifts mapped to atoms	969
Number of unparsed shifts	158
Number of shifts with mapping errors	28
Number of shifts with mapping warnings	369
Assignment completeness (well-defined parts)	62%

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)

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: ACD

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	947	914	911	5±2
2	A	22	31	31	0±1
All	All	29070	28350	28260	153

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

5 of 55 unique clashes are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom 1	Atom 2	Clash(Å)	$Distance(\mathring{A})$	Models	
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:72:LEU:HA	1:A:119:SER:OG	0.61	1.94	11	5
1:A:40:ASP:O	1:A:44:MET:HG3	0.60	1.96	1	29
1:A:11:LEU:O	1:A:15:ARG:HG3	0.59	1.95	22	11
1:A:15:ARG:HH21	2:A:201:ACD:C1	0.57	2.12	21	3
1:A:13:ARG:O	1:A:17:GLU:HG3	0.57	1.99	10	5



## 6.3 Torsion angles (i)

#### 6.3.1 Protein backbone (i)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Perce	ntiles
1	A	116/123 (94%)	110±1 (95±1%)	5±1 (5±1%)	0±0 (0±0%)	56	86
All	All	3480/3690 (94%)	3314 (95%)	161 (5%)	5 (0%)	56	86

All 2 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	HIS	3
1	A	73	ALA	2

#### 6.3.2 Protein sidechains (i)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Perce	ntiles
1	A	107/114 (94%)	104±1 (97±1%)	3±1 (3±1%)	53	92
All	All	3210/3420 (94%)	3128 (97%)	82 (3%)	53	92

5 of 28 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	15	ARG	13
1	A	40	ASP	9
1	A	109	GLN	6
1	A	96	ASN	6
1	A	48	LYS	6



#### 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)

1 ligand is modelled in this entry.

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

## 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 62% for the well-defined parts and 61% for the entire structure.

#### 7.1 Chemical shift list 1

File name: 6nbn nmr.cif

Chemical shift list name: nef\_chemical\_shift\_list\_nuevo

#### 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	1524
Number of shifts mapped to atoms	969
Number of unparsed shifts	158
Number of shifts with mapping errors	28
Number of shifts with mapping warnings	369
Number of shift outliers (ShiftChecker)	0

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

• Chemical shift has been reported more than once. First 5 (of 158) occurrences are reported below.

Shift ID	Chain	Chain Pos		Res Type		Atom	Shift Data			
	Chain	rtes	Type	Atom	Value	Uncertainty	Ambiguity			
5	A	2	GLU	HG%	2.266	0.008	1			
15	A	3	PHE	HD%	6.922	0.008	1			
29	A	4	THR	HG2%	1.056	0.006	1			
30	A	4	THR	HG2%	1.056	0.006	1			
40	A	5	VAL	HG1%	0.967	0.008	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 369) occurences are reported below.

Chain	Dog	Type	Atom		Shift Dat	a
Chain	nes	Type	Atom	Value	Shift Dat Uncertainty	Ambiguity
Α	102	PHE	HD%	7.085	0.016	1
A	18	CYS	HBx	3.329	0.004	2



Continued from previous page...

	Chain	Pos	Type	Atom		Shift Dat	a
	Chain Res		туре	Atom	Value	Uncertainty	Ambiguity
	A	71	GLN	HGx	2.303	0.005	2
	A	46	TYR	HBx	3.058	0.01	2
Ì	A	2	GLU	НВу	2.04	0.002	2

• Chain not found in structure. First 5 (of 28) occurrences are reported below.

Chain	Res	Pog Type		Type Atom			Shift Data			
Chain Re	rtes	туре	Atom	Value	Uncertainty	Ambiguity				
В	1	ACD	H15	5.667	0.013	1				
В	1	ACD	H71	2.761	0.003	1				
В	1	ACD	H192	1.177	0.012	1				
В	1	ACD	H32	1.379	0.011	1				
В	1	ACD	H41	1.811	0.005	1				

#### 7.1.2 Chemical shift referencing (i)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction $\pm$ precision, $ppm$	Suggested action
$^{13}\mathrm{C}_{\alpha}$	122	$-0.34 \pm 0.19$	None needed ( $< 0.5 \text{ ppm}$ )
$^{13}C_{\beta}$	119	$0.27 \pm 0.21$	None needed (< 0.5 ppm)
<sup>13</sup> C′	115	$-0.08 \pm 0.14$	None needed ( $< 0.5 \text{ ppm}$ )
$^{15}N$	118	$0.45 \pm 0.35$	None needed (< 0.5 ppm)

## 7.1.3 Completeness of resonance assignments (i)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 62%, i.e. 910 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1471. 17 out of 17 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	$\operatorname{Total}$	$^1{ m H}$	$^{13}\mathbf{C}$	$^{15}{ m N}$
Backbone	565/574~(98%)	$226/229 \ (99\%)$	$226/232 \ (97\%)$	113/113 (100%)
Sidechain	$278/762 \ (36\%)$	35/446~(8%)	$226/278 \ (81\%)$	17/38 (45%)
Aromatic	67/135 (50%)	35/71~(49%)	30/56 (54%)	2/8 (25%)
Overall	910/1471 (62%)	296/746 (40%)	482/566 (85%)	132/159 (83%)

## 7.1.4 Statistically unusual chemical shifts (i)

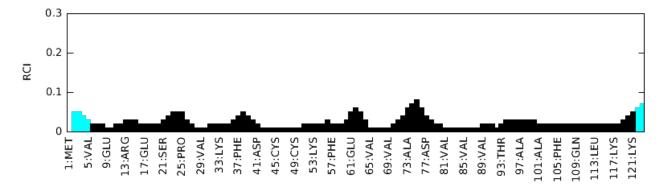
There are no statistically unusual chemical shifts.



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

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

Random coil index (RCI) for chain A:





## 8 Distance restraints analysis

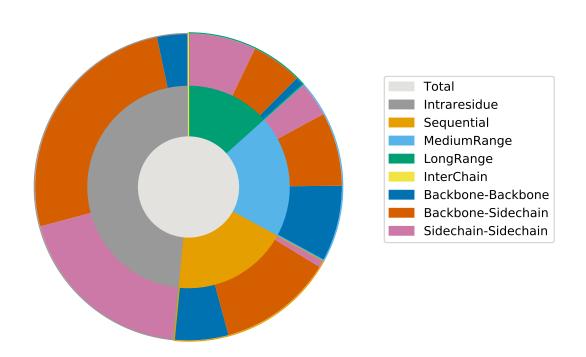
## 8.1 Distance restraints summary

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

Dogtrointa turo	$B-B^{1}(H^{4})$ $B-S^{2}(H^{4})$		C C3(TT4)	Total		
Restraints type	<b>D-D</b> ( <b>I</b> 1 )	$\mathbf{B}\text{-}\mathbf{S}^2(\mathbf{H}^4)$	$S-S^3(H^4)$	$Total(H^4)$	$RR^5$	$\%^6$
Intraresidue ( i-j =0)	52(0)	406(0)	304(0)	762(0)	5.5	48.5
Sequential ( i-j =1)	90(0)	190(0)	12(0)	292(0)	2.1	18.6
Medium range ( $ i-j >1$ and $ i-j <5$ )	127(35)	122(0)	59(0)	308(35)	2.2	19.6
Long range ( i-j ≥5)	14(4)	84(1)	112(0)	210(5)	1.5	13.4
Inter chain	0(0)	0(0)	0(0)	0(0)	0.0	0.0
Total	283(39)	802(1)	487(0)	1572(40)	11.4	100.0

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

#### 8.1.1 Pie chart: Distance restraints summary





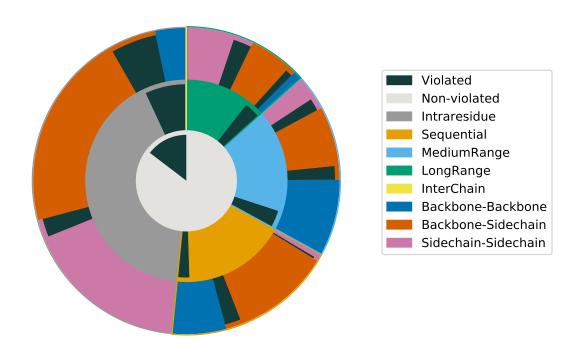
## 8.2 Distance violations summary

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

Doctroints true	$oxed{ {f B-B^1(\%^4)} {f B-S^2(\%^4)} {f S}}$		$S-S^3(\%^4)$	$\operatorname{Total}$		
Restraints type	<b>D-D</b> (%)	<b>D-3</b> (%)	S-S'(%)	$Total(\%^4)$	$RR^5$	$\%^6$
Intraresidue ( i-j =0)	0(0.0)	78(19.2)	31(10.2)	109(14.3)	0.8	47.4
Sequential ( i-j =1)	2(2.2)	27(14.2)	3(25.0)	32(11.0)	0.2	13.9
Medium range ( $ i-j >1$ and $ i-j <5$ )	2(1.6)	23(18.9)	21(35.6)	46(14.9)	0.3	20.0
Long range ( i-j ≥5)	0(0.0)	12(14.3)	31(27.7)	43(20.5)	0.3	18.7
Inter chain	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Total	4(1.4)	140(17.5)	86(17.7)	230(14.6)	1.7	100.0

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

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





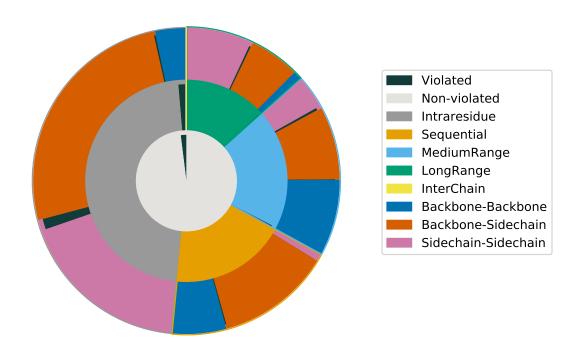
## 8.3 Consistent distance violations summary

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

Dogtroints type	$B-B^{1}(\%^{4})$	$B-S^2(\%^4)$	$S-S^3(\%^4)$	Total		
Restraints type	<b>D-D</b> (%)	<b>D-3</b> (%)	S-S'(%)	$Total(\%^4)$	$RR^5$	$\%^6$
Intraresidue ( $ i-j =0$ )	0(0.0)	3(0.7)	18(5.9)	21(2.8)	0.2	67.7
Sequential ( i-j =1)	0(0.0)	2(1.1)	0(0.0)	2(0.7)	0.0	6.5
Medium range ( $ i-j >1$ and $ i-j <5$ )	0(0.0)	1(0.8)	4(6.8)	5(1.6)	0.0	16.1
Long range ( i-j ≥5)	0(0.0)	0(0.0)	3(2.7)	3(1.4)	0.0	9.7
Inter chain	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Total	0(0.0)	6(0.7)	25(5.1)	31(2.0)	0.2	100.0

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

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





## 8.4 Residual distance violations

Violation are counted in different bin sizes and listed below

Range (Å)	Avg. No. of violated restraints per model	Max violation (Å)
0-0.2	23.4	0.2
0.2-0.5	23.6	0.5
0.5-1.0	10.7	1.0
1.0-2.0	20.9	2.0
2.0-5.0	0.4	2.79
5.0<	None	None

## 8.5 Distance violations in ensemble

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

Ī		i violat		strair	$\operatorname{nts}$	No. of violated models
$IR^1$	$SQ^2$	$ m MR^3$	$LR^4$	$IC^5$	Total	No. of violated models
20	8	9	15	0	52	1
12	10	11	8	0	41	2
11	2	2	2	0	17	3
2	1	3	2	0	8	4
11	1	2	2	0	16	5
1	2	0	1	0	4	6
1	0	0	0	0	1	7
6	0	0	0	0	6	8
5	1	1	1	0	8	9
1	0	1	0	0	2	10
1	0	1	0	0	2	11
0	0	0	0	0	0	12
1	1	1	0	0	3	13
0	1	0	1	0	2	14
0	0	1	0	0	1	15
1	0	0	0	0	1	16
1	0	0	0	0	1	17
1	0	0	0	0	1	18
0	1	1	0	0	2	19
0	1	1	0	0	2	20
2	0	2	0	0	4	21
0	0	3	0	0	3	22
0	0	0	0	0	0	23
1	0	0	5	0	6	24
3	0	0	0	0	3	25
0	1	0	0	0	1	26

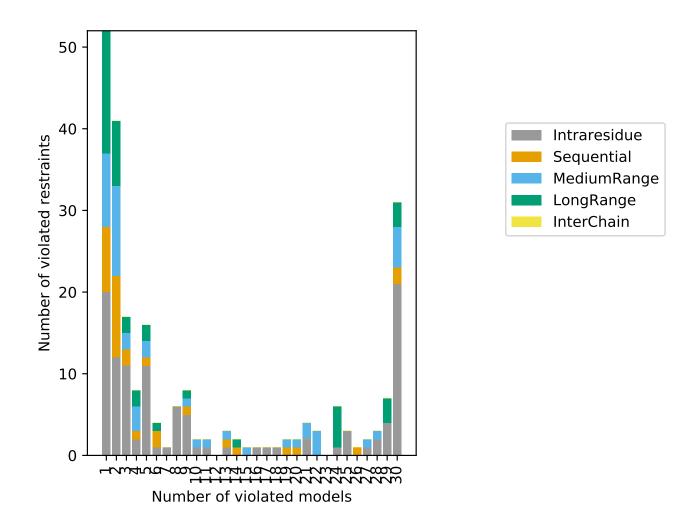


Continued from previous page...

I	No. of violated restraints					No. of violated models
$IR^1$	$SQ^2$	$MR^3$	$LR^4$	$  IC^5  $	Total	No. of violated models
1	0	1	0	0	2	27
2	0	1	0	0	3	28
4	0	0	3	0	7	29
21	2	5	3	0	31	30

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

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



653 intraresidue restraints, 260 sequential restraints, 262 medium range restraints,167 long range restraints and 0 inter chain restraints are not violated. In total, 1342 restraints are not violated in any of the models



## 8.6 Violations in each model

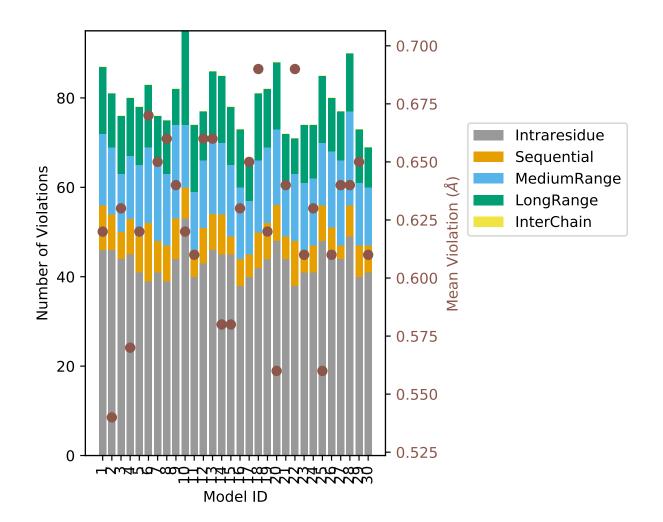
The following table lists the violation count in each model in the ensemble

Madalin		N	o. of v	iolati	ons		<b>N</b> ( ( ) )	<b>7</b> ( & )
Model ID	$IR^1$	$SQ^2$	$ m MR^3$	$LR^4$	$IC^5$	Total	Mean (Å)	Max (Å)
1	46	10	16	15	0	87	0.62	1.85
2	46	8	15	12	0	81	0.54	2.0
3	44	6	13	13	0	76	0.63	1.94
4	45	8	14	13	0	80	0.57	1.97
5	41	8	16	13	0	78	0.62	2.08
6	39	13	17	14	0	83	0.67	1.79
7	41	7	17	11	0	76	0.65	1.92
8	39	8	16	12	0	75	0.66	1.94
9	44	9	21	8	0	82	0.64	2.27
10	53	7	14	21	0	95	0.62	1.84
11	40	6	13	15	0	74	0.61	1.93
12	43	8	15	11	0	77	0.66	1.76
13	46	8	17	15	0	86	0.66	1.83
14	45	9	16	15	0	85	0.58	2.02
15	45	4	16	13	0	78	0.58	1.85
16	38	6	16	13	0	73	0.63	1.6
17	40	5	12	8	0	65	0.65	2.03
18	42	8	16	15	0	81	0.69	2.79
19	44	8	17	13	0	82	0.62	1.98
20	48	8	17	15	0	88	0.56	2.07
21	44	5	12	11	0	72	0.64	1.85
22	38	10	15	8	0	71	0.69	1.92
23	41	5	15	13	0	74	0.61	2.0
24	41	6	15	12	0	74	0.63	2.1
25	48	8	14	15	0	85	0.56	1.79
26	46	5	17	12	0	80	0.61	1.8
27	44	3	19	11	0	77	0.64	1.92
28	49	7	21	13	0	90	0.64	2.19
29	40	7	14	12	0	73	0.65	1.82
30	41	6	13	9	0	69	0.61	1.8

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



## 8.6.1 Bar graph: Violations in each model

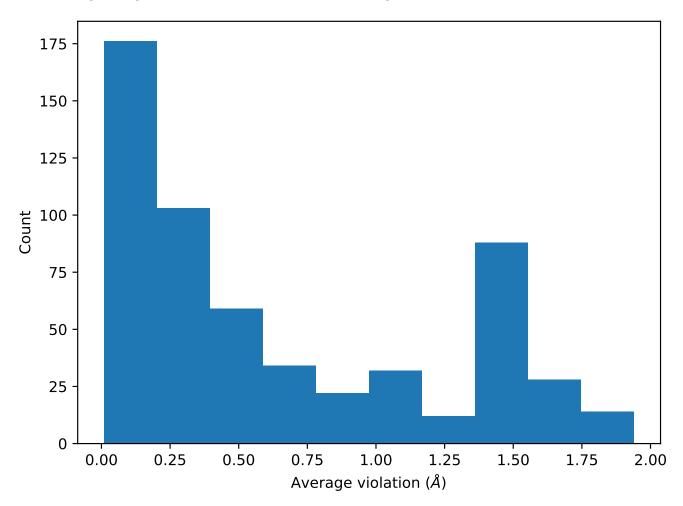




#### 8.7 Most violated distance restraints

## 8.7.1 Histogram : Distribution of mean distance violations

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



#### 8.7.2 Table: Most violated distance restraints

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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	30	0.49	0.68
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	30	0.49	0.68
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	30	1.88	2.15
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	30	1.88	2.15
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	30	1.88	2.15
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	30	1.88	2.15



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	30	1.88	2.15
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	30	1.88	2.15
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	30	0.37	0.49
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	30	0.36	0.38
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	30	1.39	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	30	1.39	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	30	1.39	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	30	1.39	1.39
(1,707)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	30	0.02	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	30	0.02	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	30	0.02	0.02
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	30	1.46	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	30	1.46	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	30	1.46	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	30	1.46	1.46
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	30	1.51	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	30	1.51	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	30	1.51	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	30	1.51	1.51
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	30	1.54	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	30	1.54	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	30	1.54	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	30	1.54	1.54
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	30	1.44	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	30	1.44	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	30	1.44	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	30	1.44	1.44
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	30	0.34	0.35
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	30	0.17	0.17
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	30	0.59	0.6
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	30	0.59	0.6
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	30	0.59	0.6
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	30	1.45	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	30	1.45	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	30	1.45	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	30	1.45	1.45
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	30	1.64	1.93
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	30	1.64	1.93
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	30	1.64	1.93
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	30	1.64	1.93
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	30	1.64	1.93
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	30	1.64	1.93



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	30	1.46	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	30	1.46	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	30	1.46	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	30	1.46	1.46
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	30	0.42	0.55
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	30	0.42	0.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	30	1.55	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	30	1.55	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	30	1.55	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	30	1.55	1.55
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	30	1.52	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	30	1.52	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	30	1.52	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	30	1.52	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	30	1.52	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	30	1.52	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	30	1.52	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	30	1.52	1.52
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	30	1.54	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	30	1.54	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	30	1.54	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	30	1.54	1.54
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	30	0.62	1.37
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	30	0.62	1.37
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	30	0.62	1.37
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	30	0.18	0.2
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	30	0.32	0.37
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	30	0.32	0.37
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	30	0.32	0.37
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	30	1.49	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	30	1.49	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	30	1.49	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	30	1.49	1.49
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	30	0.8	1.02
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	30	1.25	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	30	1.25	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	30	1.25	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	30	1.25	1.25
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	30	1.09	2.79
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	30	1.09	2.79
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	30	1.09	2.79
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	30	1.09	2.79



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	30	1.09	2.79
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	30	1.09	2.79
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	30	1.09	2.79
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	30	1.09	2.79
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	30	1.09	2.79
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	30	1.54	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	30	1.54	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	30	1.54	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	30	1.54	1.54
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	30	0.43	0.44
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	30	0.43	0.44
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	30	0.43	0.44
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	30	1.05	1.14
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	30	1.05	1.14
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	30	1.05	1.14
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	29	0.48	0.48
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	29	0.33	0.36
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	29	0.15	0.43
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	29	0.09	0.18
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	29	0.09	0.18
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	29	0.09	0.18
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	29	0.09	0.18
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	29	0.81	1.14
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	29	0.81	1.14
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	29	0.81	1.14
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	29	0.13	0.29
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	29	0.13	0.29
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	29	0.13	0.29
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	29	0.82	1.35
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	29	0.82	1.35
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	29	0.82	1.35
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	28	0.55	2.27
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	28	0.55	2.27
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	28	0.55	2.27
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	28	0.57	0.6
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	28	0.26	0.27
(1,248)	1:A:45:CYS:HB3	1:A:45:CYS:H	27	0.04	0.05
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	27	1.05	1.98
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	26	0.5	0.58
(1,379)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HB2	25	0.08	0.09
(1,1170)	1:A:63:PRO:HD3	1:A:63:PRO:HB2	25	0.02	0.05
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	25	0.38	0.41



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	24	0.41	0.46
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	24	0.41	0.46
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	24	0.41	0.46
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	24	0.41	0.46
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	24	0.41	0.46
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	24	0.41	0.46
(1,184)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:HA	24	0.01	0.01
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	24	1.16	1.2
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	24	1.16	1.2
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	24	1.16	1.2
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	24	0.23	0.58
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	24	0.13	0.24
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	24	0.13	0.24
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	24	0.13	0.24
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	24	0.22	1.42
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	24	0.22	1.42
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	24	0.22	1.42
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	22	0.42	0.54
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	22	0.42	0.54
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	22	0.42	0.54
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	22	0.42	0.54
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	22	0.42	0.54
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	22	0.42	0.54
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	22	0.39	0.57
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	22	0.39	0.57
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	22	0.39	0.57
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	22	0.9	1.01
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	21	0.46	0.48
(1,233)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:36:GLU:HG2	21	0.23	0.23
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	21	0.41	0.77
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	21	0.5	0.71
(1,289)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:107:CYS:H	20	0.04	0.12
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	20	0.24	0.48
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	19	0.42	1.32
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	19	0.42	1.32
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	19	0.18	0.3
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	19	0.18	0.3
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	19	0.18	0.3
(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	18	0.27	0.59
(1,564)	1:A:6:SER:H	1:A:6:SER:HB3	17	0.04	0.09
(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	16	0.41	0.72
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD21	15	0.65	1.92



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD22	15	0.65	1.92
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD23	15	0.65	1.92
(1,169)	1:A:3:PHE:H	1:A:2:GLU:HB2	14	0.09	0.32
(1,1463)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD3	14	0.21	0.76
(1,988)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HG2	13	0.07	0.14
(1,521)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:103:ARG:HA	13	0.12	0.33
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG21	13	0.18	1.02
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG22	13	0.18	1.02
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG23	13	0.18	1.02
(1,194)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:6:SER:HB2	11	0.54	2.22
(1,194)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:6:SER:HB2	11	0.54	2.22
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH11	11	0.16	0.25
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH12	11	0.16	0.25
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH21	11	0.16	0.25
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH22	11	0.16	0.25
(1,832)	1:A:70:HIS:HD2	1:A:70:HIS:H	10	1.21	1.4
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB2	10	0.35	0.61
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB3	10	0.35	0.61
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB2	10	0.35	0.61
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB3	10	0.35	0.61
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB2	10	0.35	0.61
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB3	10	0.35	0.61
(1,997)	1:A:12:GLN:HA	1:A:12:GLN:HG3	9	0.23	0.3
(1,692)	1:A:95:ASN:HA	1:A:95:ASN:HB3	9	0.21	0.23
(1,565)	1:A:43:THR:HG21	1:A:38:PRO:HD3	9	0.08	0.16
(1,565)	1:A:43:THR:HG22	1:A:38:PRO:HD3	9	0.08	0.16
(1,565)	1:A:43:THR:HG23	1:A:38:PRO:HD3	9	0.08	0.16
(1,1547)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:38:PRO:HD2	9	0.36	0.93
(1,1547)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB2	9	0.36	0.93
(1,1447)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HA	9	0.29	0.54
(1,1447)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HA	9	0.29	0.54
(1,1447)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HA	9	0.29	0.54
(1,121)	1:A:23:ASN:HB3	1:A:23:ASN:HA	9	0.23	0.23
(1,1183)	1:A:13:ARG:HG3	1:A:13:ARG:HD2	9	0.03	0.04
(1,1048)	1:A:119:SER:HB2	1:A:119:SER:H	9	0.1	0.12
(1,927)	1:A:27:ASP:H	1:A:27:ASP:HB3	8	0.31	0.32
(1,815)	1:A:122:LYS:HB2	1:A:122:LYS:HA	8	0.08	0.11
(1,351)	1:A:27:ASP:HA	1:A:27:ASP:HB2	8	0.36	0.37
(1,287)	1:A:84:GLU:H	1:A:84:GLU:HG3	8	0.11	0.17
(1,1182)	1:A:117:LYS:HG2	1:A:117:LYS:HE3	8	0.19	0.23
(1,1009)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:91:LYS:H	8	0.04	0.06
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH11	7	0.15	0.24



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH12	7	0.15	0.24
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH21	7	0.15	0.24
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH22	7	0.15	0.24
(1,174)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:91:LYS:HG2	6	0.16	0.16
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:20:SER:HB2	6	0.09	0.14
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:20:SER:HB3	6	0.09	0.14
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:20:SER:HB2	6	0.09	0.14
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:20:SER:HB3	6	0.09	0.14
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:20:SER:HB2	6	0.09	0.14
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:20:SER:HB3	6	0.09	0.14
(1,1483)	1:A:111:ASN:HD22	1:A:110:LYS:HE2	6	0.83	1.94
(1,1483)	1:A:111:ASN:HD22	1:A:110:LYS:HE3	6	0.83	1.94
(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD11	6	0.19	0.5
(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD12	6	0.19	0.5
(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD13	6	0.19	0.5
(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD11	6	0.19	0.5
(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD12	6	0.19	0.5
(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD13	6	0.19	0.5
(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD11	6	0.19	0.5
(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD12	6	0.19	0.5
(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD13	6	0.19	0.5
(1,969)	1:A:48:LYS:HA	1:A:48:LYS:HG2	5	0.35	0.39
(1,969)	1:A:48:LYS:HA	1:A:48:LYS:HG3	5	0.35	0.39
(1,937)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB3	5	0.24	0.27
(1,925)	1:A:55:GLN:HA	1:A:55:GLN:HG3	5	0.43	0.45
(1,886)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:H	5	0.57	0.58
(1,809)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:64:LEU:HA	5	0.8	0.87
(1,809)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:64:LEU:HA	5	0.8	0.87
(1,809)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:64:LEU:HA	5	0.8	0.87
(1,729)	1:A:91:LYS:H	1:A:91:LYS:HG3	5	0.28	0.81
(1,464)	1:A:57:PHE:HA	1:A:64:LEU:HG	5	1.71	1.8
(1,352)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB2	5	0.16	0.19
(1,315)	1:A:36:GLU:HG3	1:A:36:GLU:HA	5	0.1	0.18
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD2	1:A:14:TYR:HE1	5	0.59	0.78
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD2	1:A:14:TYR:HE2	5	0.59	0.78
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD3	1:A:14:TYR:HE1	5	0.59	0.78
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD3	1:A:14:TYR:HE2	5	0.59	0.78
(1,1520)	1:A:111:ASN:HD21	1:A:107:CYS:HA	5	0.82	1.17
(1,1520)	1:A:111:ASN:HD21	1:A:108:PHE:HA	5	0.82	1.17
(1,1482)	1:A:48:LYS:H	1:A:48:LYS:HG2	5	0.13	0.25
(1,1482)	1:A:48:LYS:H	1:A:48:LYS:HG3	5	0.13	0.25
\ ' \ / \ / \ \ \ \ \ / \ \ \ \ \ \ \ / \					



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1408)	1:A:16:THR:HG22	1:A:19:VAL:HB	5	0.25	0.38
(1,1408)	1:A:16:THR:HG23	1:A:19:VAL:HB	5	0.25	0.38
(1,1408)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HG3	5	0.25	0.38
(1,1408)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HG3	5	0.25	0.38
(1,1408)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HG3	5	0.25	0.38
(1,1025)	1:A:64:LEU:H	1:A:64:LEU:HD21	5	0.09	0.13
(1,1025)	1:A:64:LEU:H	1:A:64:LEU:HD22	5	0.09	0.13
(1,1025)	1:A:64:LEU:H	1:A:64:LEU:HD23	5	0.09	0.13
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE1	5	0.51	0.52
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE2	5	0.51	0.52
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE3	5	0.51	0.52
(1,1001)	1:A:116:ILE:H	1:A:115:LEU:HB2	5	0.03	0.07
(1,505)	1:A:24:ILE:H	1:A:24:ILE:HG12	4	0.02	0.03
(1,433)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD3	4	0.09	0.17
(1,274)	1:A:28:TYR:HA	1:A:31:LYS:HG3	4	0.7	0.78
(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH11	4	0.47	1.4
(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH12	4	0.47	1.4
(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH21	4	0.47	1.4
(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH22	4	0.47	1.4
(1,145)	1:A:95:ASN:HA	1:A:92:ASN:HD22	4	0.48	0.98
(1,1393)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD2	4	0.22	0.44
(1,1391)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:78:ALA:HA	4	0.08	0.2
(1,1391)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:78:ALA:HA	4	0.08	0.2
(1,1391)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:78:ALA:HA	4	0.08	0.2
(1,1154)	1:A:31:LYS:HA	1:A:31:LYS:HG2	4	0.32	0.35
(1,867)	1:A:103:ARG:HB3	1:A:103:ARG:H	3	0.11	0.12
(1,823)	1:A:110:LYS:HG2	1:A:110:LYS:HE2	3	0.15	0.29
(1,823)	1:A:110:LYS:HG2	1:A:110:LYS:HE3	3	0.15	0.29
(1,699)	1:A:77:ASP:HB3	1:A:80:GLU:HB2	3	0.08	0.14
(1,699)	1:A:77:ASP:HB3	1:A:80:GLU:HB3	3	0.08	0.14
(1,695)	1:A:27:ASP:H	1:A:27:ASP:HB2	3	0.37	0.37
(1,69)	1:A:30:GLU:HG2	1:A:30:GLU:HA	3	0.29	0.32
(1,661)	1:A:110:LYS:HB3	1:A:110:LYS:HG2	3	0.34	0.35
(1,655)	1:A:31:LYS:H	1:A:30:GLU:HB2	3	0.29	0.32
(1,590)	1:A:6:SER:HB2	1:A:54:MET:HE1	3	0.67	0.75
(1,590)	1:A:6:SER:HB2	1:A:54:MET:HE2	3	0.67	0.75
(1,590)	1:A:6:SER:HB2	1:A:54:MET:HE3	3	0.67	0.75
(1,49)	1:A:20:SER:H	1:A:20:SER:HB2	3	0.02	0.03
(1,49)	1:A:20:SER:H	1:A:20:SER:HB3	3	0.02	0.03
(1,475)	1:A:110:LYS:HA	1:A:110:LYS:HG3	3	0.05	0.06
(1,471)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HB3	3	0.26	0.27
, (*,*!*/	1.11.10.111100.11	111111011111001111100	_		



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,224)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:H	3	0.09	0.12
(1,224)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:H	3	0.09	0.12
(1,224)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:H	3	0.09	0.12
(1,1578)	1:A:30:GLU:HG3	1:A:27:ASP:HA	3	1.86	2.23
(1,1127)	1:A:55:GLN:HA	1:A:55:GLN:HG2	3	0.43	0.43
(1,1104)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:65:VAL:HG11	3	1.12	1.7
(1,1104)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:65:VAL:HG12	3	1.12	1.7
(1,1104)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:65:VAL:HG13	3	1.12	1.7
(1,1063)	1:A:82:ARG:HB2	1:A:82:ARG:HD3	3	0.01	0.02
(1,1063)	1:A:82:ARG:HB3	1:A:82:ARG:HD3	3	0.01	0.02
(1,991)	1:A:3:PHE:H	1:A:2:GLU:HA	2	0.16	0.17
(1,955)	1:A:51:PHE:H	1:A:50:VAL:HB	2	0.69	0.7
(1,928)	1:A:16:THR:HA	1:A:19:VAL:HB	2	0.05	0.08
(1,865)	1:A:91:LYS:H	1:A:90:ASP:HB2	2	0.04	0.05
(1,865)	1:A:91:LYS:H	1:A:90:ASP:HB3	2	0.04	0.05
(1,797)	1:A:82:ARG:HA	1:A:65:VAL:HG11	2	1.77	1.79
(1,797)	1:A:82:ARG:HA	1:A:65:VAL:HG12	2	1.77	1.79
(1,797)	1:A:82:ARG:HA	1:A:65:VAL:HG13	2	1.77	1.79
(1,70)	1:A:18:CYS:HA	1:A:21:SER:HB2	2	0.18	0.27
(1,70)	1:A:18:CYS:HA	1:A:21:SER:HB3	2	0.18	0.27
(1,674)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:32:PHE:HE1	2	0.03	0.04
(1,674)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:32:PHE:HE2	2	0.03	0.04
(1,617)	1:A:50:VAL:HB	1:A:47:ILE:HA	2	1.94	1.98
(1,580)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:65:VAL:HG11	2	1.38	1.39
(1,580)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:65:VAL:HG12	2	1.38	1.39
(1,580)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:65:VAL:HG13	2	1.38	1.39
(1,555)	1:A:96:ASN:H	1:A:92:ASN:HD22	2	0.95	1.48
(1,541)	1:A:33:LYS:HA	1:A:33:LYS:HG2	2	0.23	0.24
(1,533)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:50:VAL:HA	2	0.39	0.41
(1,533)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:50:VAL:HA	2	0.39	0.41
(1,533)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:50:VAL:HA	2	0.39	0.41
(1,500)	1:A:43:THR:H	1:A:43:THR:HG1	2	0.07	0.09
(1,478)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:46:TYR:HE1	2	0.78	0.92
(1,478)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:46:TYR:HE2	2	0.78	0.92
(1,478)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:46:TYR:HE1	2	0.78	0.92
(1,478)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:46:TYR:HE2	2	0.78	0.92
(1,478)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:46:TYR:HE1	2	0.78	0.92
(1,478)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:46:TYR:HE2	2	0.78	0.92
(1,449)	1:A:4:THR:HA	1:A:4:THR:HG21	2	0.26	0.27
(1,449)	1:A:4:THR:HA	1:A:4:THR:HG22	2	0.26	0.27
(1,449)	1:A:4:THR:HA	1:A:4:THR:HG23	2	0.26	0.27
(1,424)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:15:ARG:HA	2	0.97	1.1



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

1,424	Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,411)         1:A:65:VAL:H         1:A:65:VAL:HB         2         0.07         0.08           (1,384)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:71:GLN:H         2         0.09         0.12           (1,376)         1:A:65:VAL:HG21         1:A:65:VAL:H         2         1.06         1.07           (1,376)         1:A:65:VAL:HG22         1:A:65:VAL:H         2         1.06         1.07           (1,376)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:65:VAL:H         2         1.06         1.07           (1,376)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:65:VAL:HB         2         1.06         0.01           (1,319)         1:A:66:ASP:H         1:A:65:VAL:HB         2         1.08         1.09           (1,168)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:18:CYS:HB2         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41	(1,424)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:15:ARG:HA	2	0.97	1.1
1.384	(1,424)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:15:ARG:HA	2	0.97	1.1
(1,376)         1:A:65:VAL:HG21         1:A:65:VAL:H         2         1.06         1.07           (1,376)         1:A:65:VAL:HG22         1:A:65:VAL:H         2         1.06         1.07           (1,376)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:65:VAL:H         2         1.06         1.07           (1,374)         1:A:16:THR:HB         1:A:16:THR:H         2         0.06         0.1           (1,319)         1:A:66:ASP:H         1:A:18:CYS:HB2         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB2         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,160)         1:A:6:GUHA         1:A:2:GLU:HG2         2         0.15         0.22 <tr< td=""><td>(1,411)</td><td>1:A:65:VAL:H</td><td>1:A:65:VAL:HB</td><td>2</td><td>0.07</td><td>0.08</td></tr<>	(1,411)	1:A:65:VAL:H	1:A:65:VAL:HB	2	0.07	0.08
(1,376)         1:A:65:VAL:HG22         1:A:65:VAL:HG23         1:A:65:VAL:HG23         1:A:65:VAL:H         2         1.06         1.07           (1,374)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:65:VAL:H         2         1.06         1.07           (1,324)         1:A:66:VAL:HGB1         1:A:65:VAL:HB         2         1.08         1.09           (1,1319)         1:A:65:VAL:HG21         1:A:18:CYS:HB2         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:18:CYS:HB2         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:18:CYS:HB2         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB2         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB2         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:2:GLU:HA         1:A:2:GLU:HG2         2         0.15         0.24           (1,160)         1:A:3:TRH:HG23         1:A:18:GLU:HA	(1,384)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:71:GLN:H	2	0.09	0.12
(1,376)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:65:VAL:H         2         1.06         1.07           (1,324)         1:A:16:THR:HB         1:A:16:THR:H         2         0.06         0.1           (1,319)         1:A:66:ASP:H         1:A:65:VAL:HB         2         1.08         1.09           (1,168)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:18:CYS:HB2         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,166)         1:A:2:GLU:HA         1:A:2:GLU:HG2         2         0.15         0.24           (1,166)         1:A:3:6:THR:HG23         1:A:10:ASP:O         2         0.04         0.05	(1,376)	1:A:65:VAL:HG21	1:A:65:VAL:H	2	1.06	1.07
(1,324)         1:A:16:THR:HB         1:A:16:THR:HB         2         0.06         0.1           (1,319)         1:A:66:ASP:H         1:A:65:VAL:HB         2         1.08         1.09           (1,168)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,166)         1:A:2:GLU:HA         1:A:2:GLU:HG2         2         0.15         0.24           (1,166)         1:A:2:GLU:HA         1:A:2:GLU:HG3         2         0.15         0.24           (1,161)         1:A:4:4:TYR:H         1:A:10:ASP:O         2         0.04         0.05           (1,1569)         1:A:8:THR:HG21         1:A:12:GLN:HG2         2         0.44         0.82 <t< td=""><td>(1,376)</td><td>1:A:65:VAL:HG22</td><td>1:A:65:VAL:H</td><td>2</td><td>1.06</td><td>1.07</td></t<>	(1,376)	1:A:65:VAL:HG22	1:A:65:VAL:H	2	1.06	1.07
(1,319)         1:A:66:ASP:H         1:A:65:VAL:HB         2         1.08         1.09           (1,168)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:18:CYS:HB2         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:18:CYS:HB2         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB2         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,166)         1:A:2:GU:HA         1:A:2:GU:HG2         2         0.15         0.24           (1,166)         1:A:2:GU:HA         1:A:2:GU:HG3         2         0.15         0.24           (1,161)         1:A:14:TYR:H         1:A:10:ASP:O         2         0.04         0.05           (1,1569)         1:A:8:THR:HG21         1:A:12:GLN:HG2         2         0.44         0.82           (1,1569)         1:A:8:THR:HG23         1:A:12:GLN:HG2         2         0.44         0.82 <tr< td=""><td>(1,376)</td><td>1:A:65:VAL:HG23</td><td>1:A:65:VAL:H</td><td>2</td><td>1.06</td><td>1.07</td></tr<>	(1,376)	1:A:65:VAL:HG23	1:A:65:VAL:H	2	1.06	1.07
(1,168)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:18:CYS:HB2         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:18:CYS:HB2         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB2         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,166)         1:A:2:GLU:HA         1:A:2:GLU:HG2         2         0.15         0.24           (1,166)         1:A:2:GLU:HA         1:A:2:GLU:HG3         2         0.15         0.24           (1,166)         1:A:3:THR:HG21         1:A:10:ASP:O         2         0.04         0.05           (1,1569)         1:A:8:THR:HG21         1:A:12:GLN:HG2         2         0.44         0.82           (1,1569)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG11         2         0.22         0.23 <td>(1,324)</td> <td>1:A:16:THR:HB</td> <td>1:A:16:THR:H</td> <td></td> <td>0.06</td> <td>0.1</td>	(1,324)	1:A:16:THR:HB	1:A:16:THR:H		0.06	0.1
(1,168)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:18:CYS:HB2         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB2         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,166)         1:A:2:GLU:HA         1:A:2:GLU:HG2         2         0.15         0.24           (1,166)         1:A:2:GLU:HA         1:A:2:GLU:HG3         2         0.15         0.24           (1,161)         1:A:14:TYR:H         1:A:10:ASP:O         2         0.04         0.05           (1,1569)         1:A:8:THR:HG21         1:A:12:GLN:HG2         2         0.44         0.82           (1,1569)         1:A:8:THR:HG23         1:A:12:GLN:HG2         2         0.44         0.82           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG11         2         0.22         0.23           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         2         0.22         0.23 <td>(1,319)</td> <td>1:A:66:ASP:H</td> <td>1:A:65:VAL:HB</td> <td></td> <td>1.08</td> <td>1.09</td>	(1,319)	1:A:66:ASP:H	1:A:65:VAL:HB		1.08	1.09
(1,168)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:18:CYS:HB2         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB2         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,166)         1:A:2:GLU:HA         1:A:2:GLU:HG2         2         0.15         0.24           (1,166)         1:A:2:GLU:HA         1:A:2:GLU:HG3         2         0.15         0.24           (1,166)         1:A:2:GLU:HA         1:A:2:GLU:HG3         2         0.15         0.24           (1,166)         1:A:2:GTU:HA         1:A:2:GLU:HG3         2         0.04         0.05           (1,1611)         1:A:14:TYR:H         1:A:10:ASP:O         2         0.04         0.05           (1,1569)         1:A:8:THR:HG21         1:A:12:GLN:HG2         2         0.44         0.82           (1,1569)         1:A:6:ASP:HA         1:A:6:S:VAL:HG11         2         0.22         0.23           (1,1560)         1:A:6:ASP:HA         1:A:6:VAL:HG13         2         0.22         0.23 <t< td=""><td>(1,168)</td><td>1:A:50:VAL:HG21</td><td>1:A:18:CYS:HB2</td><td>2</td><td>1.4</td><td>1.41</td></t<>	(1,168)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:18:CYS:HB2	2	1.4	1.41
(1,168)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB2         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,166)         1:A:2:GLU:HA         1:A:2:GLU:HG2         2         0.15         0.24           (1,166)         1:A:2:GLU:HA         1:A:2:GLU:HG3         2         0.15         0.24           (1,1611)         1:A:14:TYR:H         1:A:10:ASP:O         2         0.04         0.05           (1,1569)         1:A:8:THR:HG21         1:A:12:GLN:HG2         2         0.44         0.82           (1,1569)         1:A:8:THR:HG22         1:A:12:GLN:HG2         2         0.44         0.82           (1,1569)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG12         2         0.44         0.82           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG11         2         0.22         0.23           (1,1550)         1:A:56:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         2         0.22         0.23           (1,1510)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67     <	(1,168)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:18:CYS:HB3	2	1.4	1.41
(1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB2         2         1.4         1.41           (1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,166)         1:A:2:GLU:HA         1:A:2:GLU:HG2         2         0.15         0.24           (1,166)         1:A:2:GLU:HA         1:A:2:GLU:HG3         2         0.15         0.24           (1,1611)         1:A:14:TYR:H         1:A:10:ASP:O         2         0.04         0.05           (1,1569)         1:A:8:THR:HG21         1:A:12:GLN:HG2         2         0.44         0.82           (1,1569)         1:A:8:THR:HG22         1:A:12:GLN:HG2         2         0.44         0.82           (1,1569)         1:A:8:THR:HG23         1:A:12:GLN:HG2         2         0.44         0.82           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG11         2         0.22         0.23           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG12         2         0.22         0.23           (1,1550)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         2         0.22         0.23           (1,1550)         1:A:60:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         2         0.6         0.6 </td <td>(1,168)</td> <td>1:A:50:VAL:HG22</td> <td>1:A:18:CYS:HB2</td> <td>2</td> <td>1.4</td> <td>1.41</td>	(1,168)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:18:CYS:HB2	2	1.4	1.41
(1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,166)         1:A:2:GLU:HA         1:A:2:GLU:HG2         2         0.15         0.24           (1,166)         1:A:2:GLU:HA         1:A:2:GLU:HG3         2         0.15         0.24           (1,161)         1:A:14:TYR:H         1:A:10:ASP:O         2         0.04         0.05           (1,1569)         1:A:8:THR:HG21         1:A:12:GLN:HG2         2         0.44         0.82           (1,1569)         1:A:8:THR:HG22         1:A:12:GLN:HG2         2         0.44         0.82           (1,1569)         1:A:8:THR:HG23         1:A:12:GLN:HG2         2         0.44         0.82           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG12         2         0.22         0.23           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG12         2         0.22         0.23           (1,1550)         1:A:52:ASN:HD21         1:A:57:PHE:H         2         1.22         1.32           (1,1550)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67     <	(1,168)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:18:CYS:HB3	2	1.4	1.41
(1,168)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:18:CYS:HB3         2         1.4         1.41           (1,166)         1:A:2:GLU:HA         1:A:2:GLU:HG2         2         0.15         0.24           (1,166)         1:A:2:GLU:HA         1:A:2:GLU:HG3         2         0.15         0.24           (1,1611)         1:A:14:TYR:H         1:A:10:ASP:O         2         0.04         0.05           (1,1569)         1:A:8:THR:HG21         1:A:12:GLN:HG2         2         0.44         0.82           (1,1569)         1:A:8:THR:HG22         1:A:12:GLN:HG2         2         0.44         0.82           (1,1569)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG12         2         0.44         0.82           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG11         2         0.22         0.23           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         2         0.22         0.23           (1,1550)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:57:PHE:H         2         1.22         1.32           (1,1550)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67	(1,168)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:18:CYS:HB2	2	1.4	1.41
(1,166)         1:A:2:GLU:HA         1:A:2:GLU:HG3         2         0.15         0.24           (1,1611)         1:A:14:TYR:H         1:A:10:ASP:O         2         0.04         0.05           (1,1569)         1:A:8:THR:HG21         1:A:12:GLN:HG2         2         0.44         0.82           (1,1569)         1:A:8:THR:HG22         1:A:12:GLN:HG2         2         0.44         0.82           (1,1569)         1:A:6:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG12         2         0.44         0.82           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG11         2         0.22         0.23           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG12         2         0.22         0.23           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         2         0.22         0.23           (1,1550)         1:A:56:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         2         0.22         0.23           (1,1515)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:55:PHE:H         2         0.11         0.12           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:HR:HG23         2         0.6         0.67	(1,168)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:18:CYS:HB3	2	1.4	1.41
(1,1611)         1:A:14:TYR:H         1:A:10:ASP:O         2         0.04         0.05           (1,1569)         1:A:8:THR:HG21         1:A:12:GLN:HG2         2         0.44         0.82           (1,1569)         1:A:8:THR:HG22         1:A:12:GLN:HG2         2         0.44         0.82           (1,1569)         1:A:8:THR:HG23         1:A:12:GLN:HG2         2         0.44         0.82           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG11         2         0.22         0.23           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG12         2         0.22         0.23           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         2         0.22         0.23           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         2         0.22         0.23           (1,1550)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         2         0.22         0.23           (1,1515)         1:A:55:ASS:HD21         1:A:57:PHE:H         2         0.11         0.12           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67 <td>(1,166)</td> <td>1:A:2:GLU:HA</td> <td>1:A:2:GLU:HG2</td> <td>2</td> <td>0.15</td> <td>0.24</td>	(1,166)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HG2	2	0.15	0.24
(1,1569)         1:A:8:THR:HG21         1:A:12:GLN:HG2         2         0.44         0.82           (1,1569)         1:A:8:THR:HG22         1:A:12:GLN:HG2         2         0.44         0.82           (1,1569)         1:A:8:THR:HG23         1:A:12:GLN:HG2         2         0.44         0.82           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG11         2         0.22         0.23           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG12         2         0.22         0.23           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         2         0.22         0.23           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:57:PHE:H         2         0.22         0.23           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         2         0.22         0.23           (1,1550)         1:A:66:ASP:HA         1:A:55:PHE:H         2         0.22         0.23           (1,1550)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         2         0.6         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67           (1,1478)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67 <td>(1,166)</td> <td>1:A:2:GLU:HA</td> <td>1:A:2:GLU:HG3</td> <td>2</td> <td>0.15</td> <td>0.24</td>	(1,166)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HG3	2	0.15	0.24
(1,1569)         1:A:8:THR:HG22         1:A:12:GLN:HG2         2         0.44         0.82           (1,1569)         1:A:8:THR:HG23         1:A:12:GLN:HG2         2         0.44         0.82           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG11         2         0.22         0.23           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG12         2         0.22         0.23           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         2         0.22         0.23           (1,1550)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         2         0.22         0.23           (1,1550)         1:A:56:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         2         0.22         0.23           (1,1550)         1:A:55:ASN:HD21         1:A:57:PHE:H         2         0.11         0.12           (1,1550)         1:A:55:ASN:HD21         1:A:55:WET:HG3         2         0.6         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67           (1,1478)         1:A:59:GLU:HA         1:A:8:THR:HG21         2         0.28         0.52           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG22         2         0.28         0.52	(1,1611)	1:A:14:TYR:H	1:A:10:ASP:O	2	0.04	0.05
(1,1569)         1:A:8:THR:HG23         1:A:12:GLN:HG2         2         0.44         0.82           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG11         2         0.22         0.23           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG12         2         0.22         0.23           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         2         0.22         0.23           (1,1550)         1:A:66:ASP:HA         1:A:57:PHE:H         2         1.22         1.32           (1,1550)         1:A:52:ASN:HD21         1:A:57:PHE:H         2         0.11         0.12           (1,1515)         1:A:35:TRP:H         1:A:35:TRP:HD1         2         0.11         0.12           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG21         2         0.28         0.52           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG22         2         0.28         0.52           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG23         2         0.73         1.01	(1,1569)	1:A:8:THR:HG21	1:A:12:GLN:HG2	2	0.44	0.82
(1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG11         2         0.22         0.23           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG12         2         0.22         0.23           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         2         0.22         0.23           (1,1550)         1:A:52:ASN:HD21         1:A:57:PHE:H         2         1.22         1.32           (1,1515)         1:A:35:TRP:H         1:A:57:PHE:H         2         0.11         0.12           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG21         2         0.28         0.52           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG22         2         0.28         0.52           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG23         2         0.73         1.01           (1,1470)         1:A:84:GLU:HA         1:A:8:THR:HG23         2         0.73         1.01	(1,1569)	1:A:8:THR:HG22	1:A:12:GLN:HG2	2	0.44	0.82
(1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG12         2         0.22         0.23           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         2         0.22         0.23           (1,1550)         1:A:52:ASN:HD21         1:A:57:PHE:H         2         1.22         1.32           (1,1515)         1:A:35:TRP:H         1:A:35:TRP:HD1         2         0.11         0.12           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG21         2         0.28         0.52           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG22         2         0.28         0.52           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG23         2         0.33         1.01     <	(1,1569)	1:A:8:THR:HG23	1:A:12:GLN:HG2	2	0.44	0.82
(1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         2         0.22         0.23           (1,1550)         1:A:52:ASN:HD21         1:A:57:PHE:H         2         1.22         1.32           (1,1515)         1:A:35:TRP:H         1:A:35:TRP:HD1         2         0.11         0.12           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG21         2         0.28         0.52           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG22         2         0.28         0.52           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG23         2         0.28         0.52           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG23         2         0.28         0.52           (1,1478)         1:A:49:GLU:HA         1:A:8:THR:HG23         2         0.28         0.52           (1,1479)         1:A:84:GLU:HA         1:A:8:87:LYS:HD2         2         0.73         1.01	(1,1560)	1:A:66:ASP:HA	1:A:65:VAL:HG11	2	0.22	0.23
(1,1550)         1:A:52:ASN:HD21         1:A:57:PHE:H         2         1.22         1.32           (1,1515)         1:A:35:TRP:H         1:A:35:TRP:HD1         2         0.11         0.12           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG21         2         0.28         0.52           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG22         2         0.28         0.52           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG23         2         0.28         0.52           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG23         2         0.28         0.52           (1,1478)         1:A:4:4:GLU:HA         1:A:87:LYS:HD2         2         0.73         1.01           (1,1440)         1:A:84:GLU:HA         1:A:87:LYS:HD3         2         0.73         1.01           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         2         0.33         0.36	(1,1560)	1:A:66:ASP:HA	1:A:65:VAL:HG12	2	0.22	0.23
(1,1515)         1:A:35:TRP:H         1:A:35:TRP:HD1         2         0.11         0.12           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG21         2         0.28         0.52           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG22         2         0.28         0.52           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG23         2         0.28         0.52           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG23         2         0.28         0.52           (1,1440)         1:A:84:GLU:HA         1:A:87:LYS:HD2         2         0.73         1.01           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         2         0.73         1.01           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:54:MET:HG3         2         0.33         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB3         2         0.33         0.36 <td>(1,1560)</td> <td>1:A:66:ASP:HA</td> <td>1:A:65:VAL:HG13</td> <td>2</td> <td>0.22</td> <td>0.23</td>	(1,1560)	1:A:66:ASP:HA	1:A:65:VAL:HG13	2	0.22	0.23
(1,1509)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG21         2         0.28         0.52           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG22         2         0.28         0.52           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG23         2         0.28         0.52           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG23         2         0.28         0.52           (1,1478)         1:A:84:GLU:HA         1:A:87:LYS:HD2         2         0.73         1.01           (1,1470)         1:A:84:GLU:HA         1:A:87:LYS:HD3         2         0.73         1.01           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         2         0.33         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB2         2         0.33         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB3         2         0.33         0.36 <td>(1,1550)</td> <td>1:A:52:ASN:HD21</td> <td>1:A:57:PHE:H</td> <td>2</td> <td>1.22</td> <td>1.32</td>	(1,1550)	1:A:52:ASN:HD21	1:A:57:PHE:H	2	1.22	1.32
(1,1509)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG21         2         0.28         0.52           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG22         2         0.28         0.52           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG23         2         0.28         0.52           (1,1440)         1:A:84:GLU:HA         1:A:87:LYS:HD2         2         0.73         1.01           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         2         0.33         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:54:MET:HG3         2         0.33         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB2         2         0.33         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB3         2         0.33         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB3         2         0.33         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB3         2         0.33         0	(1,1515)	1:A:35:TRP:H	1:A:35:TRP:HD1	2	0.11	0.12
(1,1509)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:54:MET:HG3         2         0.6         0.67           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG21         2         0.28         0.52           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG22         2         0.28         0.52           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG23         2         0.28         0.52           (1,1440)         1:A:84:GLU:HA         1:A:87:LYS:HD2         2         0.73         1.01           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         2         0.33         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:54:MET:HG3         2         0.33         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB2         2         0.33         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB3         2         0.33         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB2         2         0.33         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB3         2         0.33         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB3         2         0.33	(1,1509)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:54:MET:HG3	2	0.6	0.67
(1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG21         2         0.28         0.52           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG22         2         0.28         0.52           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG23         2         0.28         0.52           (1,1440)         1:A:84:GLU:HA         1:A:87:LYS:HD2         2         0.73         1.01           (1,1440)         1:A:84:GLU:HA         1:A:87:LYS:HD3         2         0.73         1.01           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         2         0.33         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:54:MET:HG3         2         0.33         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB2         2         0.33         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB3         2         0.33         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB2         2         0.33         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB2         2         0.33         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB3         2         0.33         0	(1,1509)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:54:MET:HG3	2	0.6	0.67
(1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG22         2         0.28         0.52           (1,1478)         1:A:9:GLU:HA         1:A:8:THR:HG23         2         0.28         0.52           (1,1440)         1:A:84:GLU:HA         1:A:87:LYS:HD2         2         0.73         1.01           (1,1440)         1:A:84:GLU:HA         1:A:87:LYS:HD3         2         0.73         1.01           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         2         0.33         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:54:MET:HG3         2         0.33         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB2         2         0.33         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB3         2         0.33         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB2         2         0.33         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB2         2         0.33         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB3         2         0.33         0.36	(1,1509)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:54:MET:HG3	2	0.6	0.67
(1,1478)       1:A:9:GLU:HA       1:A:8:THR:HG23       2       0.28       0.52         (1,1440)       1:A:84:GLU:HA       1:A:87:LYS:HD2       2       0.73       1.01         (1,1440)       1:A:84:GLU:HA       1:A:87:LYS:HD3       2       0.73       1.01         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG11       1:A:54:MET:HG3       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:54:MET:HG3       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG11       1:A:14:TYR:HB2       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG11       1:A:14:TYR:HB3       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:14:TYR:HB2       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:14:TYR:HB3       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:14:TYR:HB3       2       0.33       0.36	(1,1478)	1:A:9:GLU:HA	1:A:8:THR:HG21	2	0.28	0.52
(1,1440)       1:A:84:GLU:HA       1:A:87:LYS:HD2       2       0.73       1.01         (1,1440)       1:A:84:GLU:HA       1:A:87:LYS:HD3       2       0.73       1.01         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG11       1:A:54:MET:HG3       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:54:MET:HG3       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG13       1:A:14:TYR:HB2       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG11       1:A:14:TYR:HB3       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:14:TYR:HB2       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:14:TYR:HB3       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:14:TYR:HB3       2       0.33       0.36	(1,1478)	1:A:9:GLU:HA	1:A:8:THR:HG22	2	0.28	0.52
(1,1440)       1:A:84:GLU:HA       1:A:87:LYS:HD2       2       0.73       1.01         (1,1440)       1:A:84:GLU:HA       1:A:87:LYS:HD3       2       0.73       1.01         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG11       1:A:54:MET:HG3       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:54:MET:HG3       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG13       1:A:14:TYR:HB2       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG11       1:A:14:TYR:HB3       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:14:TYR:HB2       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:14:TYR:HB3       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:14:TYR:HB3       2       0.33       0.36	(1,1478)	1:A:9:GLU:HA	1:A:8:THR:HG23		0.28	0.52
(1,1440)       1:A:84:GLU:HA       1:A:87:LYS:HD3       2       0.73       1.01         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG11       1:A:54:MET:HG3       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:54:MET:HG3       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG13       1:A:54:MET:HG3       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG11       1:A:14:TYR:HB2       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:14:TYR:HB2       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:14:TYR:HB2       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:14:TYR:HB3       2       0.33       0.36	, ,	1:A:84:GLU:HA	1:A:87:LYS:HD2	2	0.73	1.01
(1,1376)       1:A:50:VAL:HG11       1:A:54:MET:HG3       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:54:MET:HG3       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG13       1:A:54:MET:HG3       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG11       1:A:14:TYR:HB2       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG11       1:A:14:TYR:HB3       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:14:TYR:HB2       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:14:TYR:HB3       2       0.33       0.36		1:A:84:GLU:HA	1:A:87:LYS:HD3	2	0.73	1.01
(1,1376)       1:A:50:VAL:HG13       1:A:54:MET:HG3       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG11       1:A:14:TYR:HB2       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG11       1:A:14:TYR:HB3       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:14:TYR:HB2       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:14:TYR:HB3       2       0.33       0.36	· · /	1:A:50:VAL:HG11	1:A:54:MET:HG3	2	0.33	0.36
(1,1376)       1:A:50:VAL:HG11       1:A:14:TYR:HB2       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG11       1:A:14:TYR:HB3       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:14:TYR:HB2       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:14:TYR:HB3       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:14:TYR:HB3       2       0.33       0.36	(1,1376)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:54:MET:HG3	2	0.33	0.36
(1,1376)       1:A:50:VAL:HG11       1:A:14:TYR:HB2       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG11       1:A:14:TYR:HB3       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:14:TYR:HB2       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:14:TYR:HB3       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:14:TYR:HB3       2       0.33       0.36	(1,1376)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:54:MET:HG3	2	0.33	0.36
(1,1376)       1:A:50:VAL:HG11       1:A:14:TYR:HB3       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:14:TYR:HB2       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:14:TYR:HB3       2       0.33       0.36	· · /	1:A:50:VAL:HG11	1:A:14:TYR:HB2	2	0.33	0.36
(1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:14:TYR:HB2       2       0.33       0.36         (1,1376)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:14:TYR:HB3       2       0.33       0.36		1:A:50:VAL:HG11	1:A:14:TYR:HB3	2	0.33	0.36
(1,1376) 1:A:50:VAL:HG12 1:A:14:TYR:HB3 2 0.33 0.36	/	1:A:50:VAL:HG12	1:A:14:TYR:HB2	2	0.33	0.36
	(1,1376)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:14:TYR:HB3	2	0.33	0.36
	(1,1376)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:14:TYR:HB2	2	0.33	0.36



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:14:TYR:HB3	2	0.33	0.36
(1,1233)	1:A:14:TYR:HD1	1:A:54:MET:HG3	2	0.21	0.3
(1,1233)	1:A:14:TYR:HD2	1:A:54:MET:HG3	2	0.21	0.3
(1,1228)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:LYS:HB2	2	0.49	0.52
(1,1201)	1:A:50:VAL:H	1:A:50:VAL:HG21	2	0.15	0.25
(1,1201)	1:A:50:VAL:H	1:A:50:VAL:HG22	2	0.15	0.25
(1,1201)	1:A:50:VAL:H	1:A:50:VAL:HG23	2	0.15	0.25
(1,12)	1:A:22:LEU:H	1:A:21:SER:HB2	2	0.13	0.13
(1,12)	1:A:22:LEU:H	1:A:21:SER:HB3	2	0.13	0.13
(1,1186)	1:A:74:HIS:HD2	1:A:74:HIS:HA	2	0.09	0.1
(1,1171)	1:A:50:VAL:HB	1:A:50:VAL:H	2	0.45	0.47
(1,1122)	1:A:14:TYR:HD1	1:A:11:LEU:HD11	2	0.08	0.12
(1,1122)	1:A:14:TYR:HD1	1:A:11:LEU:HD12	2	0.08	0.12
(1,1122)	1:A:14:TYR:HD1	1:A:11:LEU:HD13	2	0.08	0.12
(1,1122)	1:A:14:TYR:HD2	1:A:11:LEU:HD11	2	0.08	0.12
(1,1122)	1:A:14:TYR:HD2	1:A:11:LEU:HD12	2	0.08	0.12
(1,1122)	1:A:14:TYR:HD2	1:A:11:LEU:HD13	2	0.08	0.12
(1,1076)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:71:GLN:HE22	2	0.12	0.18
(1,1076)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:71:GLN:HE22	2	0.12	0.18
(1,1076)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:71:GLN:HE22	2	0.12	0.18
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:51:PHE:HD1	2	1.16	1.36
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:51:PHE:HD2	2	1.16	1.36
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:51:PHE:HD1	2	1.16	1.36
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:51:PHE:HD2	2	1.16	1.36
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:51:PHE:HD1	2	1.16	1.36
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:51:PHE:HD2	2	1.16	1.36
(1,99)	1:A:84:GLU:HB2	1:A:81:VAL:HA	1	0.3	0.3
(1,99)	1:A:84:GLU:HB3	1:A:81:VAL:HA	1	0.3	0.3
(1,983)	1:A:50:VAL:H	1:A:50:VAL:HG11	1	0.05	0.05
(1,983)	1:A:50:VAL:H	1:A:50:VAL:HG12	1	0.05	0.05
(1,983)	1:A:50:VAL:H	1:A:50:VAL:HG13	1	0.05	0.05
(1,964)	1:A:83:THR:H	1:A:83:THR:HB	1	0.06	0.06
(1,961)	1:A:41:ASP:H	1:A:40:ASP:HB2	1	0.02	0.02
(1,94)	1:A:63:PRO:HB3	1:A:68:LEU:HD11	1	0.06	0.06
(1,94)	1:A:63:PRO:HB3	1:A:68:LEU:HD12	1	0.06	0.06
(1,94)	1:A:63:PRO:HB3	1:A:68:LEU:HD13	1	0.06	0.06
(1,934)	1:A:106:LYS:HA	1:A:109:GLN:HG3	1	0.39	0.39
(1,929)	1:A:69:VAL:HA	1:A:69:VAL:HG11	1	0.11	0.11
(1,929)	1:A:69:VAL:HA	1:A:69:VAL:HG12	1	0.11	0.11
(1,929)	1:A:69:VAL:HA	1:A:69:VAL:HG13	1	0.11	0.11
(1,921)	1:A:86:LEU:HA	1:A:85:VAL:HG11	1	1.42	1.42
(1,921)	1:A:86:LEU:HA	1:A:85:VAL:HG12	1	1.42	1.42



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,921)	1:A:86:LEU:HA	1:A:85:VAL:HG13	1	1.42	1.42
(1,901)	1:A:69:VAL:H	1:A:69:VAL:HG21	1	0.45	0.45
(1,901)	1:A:69:VAL:H	1:A:69:VAL:HG22	1	0.45	0.45
(1,901)	1:A:69:VAL:H	1:A:69:VAL:HG23	1	0.45	0.45
(1,897)	1:A:84:GLU:H	1:A:83:THR:HG21	1	0.17	0.17
(1,897)	1:A:84:GLU:H	1:A:83:THR:HG22	1	0.17	0.17
(1,897)	1:A:84:GLU:H	1:A:83:THR:HG23	1	0.17	0.17
(1,885)	1:A:28:TYR:H	1:A:28:TYR:HD1	1	0.16	0.16
(1,885)	1:A:28:TYR:H	1:A:28:TYR:HD2	1	0.16	0.16
(1,87)	1:A:69:VAL:HA	1:A:69:VAL:HG11	1	0.16	0.16
(1,87)	1:A:69:VAL:HA	1:A:69:VAL:HG12	1	0.16	0.16
(1,87)	1:A:69:VAL:HA	1:A:69:VAL:HG13	1	0.16	0.16
(1,87)	1:A:69:VAL:HA	1:A:69:VAL:HG21	1	0.16	0.16
(1,87)	1:A:69:VAL:HA	1:A:69:VAL:HG22	1	0.16	0.16
(1,87)	1:A:69:VAL:HA	1:A:69:VAL:HG23	1	0.16	0.16
(1,856)	1:A:70:HIS:H	1:A:69:VAL:HB	1	0.93	0.93
(1,844)	1:A:44:MET:HA	1:A:44:MET:HG2	1	0.35	0.35
(1,826)	1:A:87:LYS:HA	1:A:87:LYS:HG2	1	0.42	0.42
(1,806)	1:A:123:ASP:H	1:A:122:LYS:HA	1	0.55	0.55
(1,74)	1:A:85:VAL:HG21	1:A:108:PHE:HE1	1	1.43	1.43
(1,74)	1:A:85:VAL:HG21	1:A:108:PHE:HE2	1	1.43	1.43
(1,74)	1:A:85:VAL:HG22	1:A:108:PHE:HE1	1	1.43	1.43
(1,74)	1:A:85:VAL:HG22	1:A:108:PHE:HE2	1	1.43	1.43
(1,74)	1:A:85:VAL:HG23	1:A:108:PHE:HE1	1	1.43	1.43
(1,74)	1:A:85:VAL:HG23	1:A:108:PHE:HE2	1	1.43	1.43
(1,727)	1:A:51:PHE:HA	1:A:51:PHE:HD1	1	0.08	0.08
(1,727)	1:A:51:PHE:HA	1:A:51:PHE:HD2	1	0.08	0.08
(1,712)	1:A:65:VAL:HA	1:A:85:VAL:HG11	1	0.98	0.98
(1,712)	1:A:65:VAL:HA	1:A:85:VAL:HG12	1	0.98	0.98
(1,712)	1:A:65:VAL:HA	1:A:85:VAL:HG13	1	0.98	0.98
(1,697)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:85:VAL:HA	1	0.36	0.36
(1,697)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:85:VAL:HA	1	0.36	0.36
(1,688)	1:A:82:ARG:HA	1:A:69:VAL:HG21	1	1.58	1.58
(1,688)	1:A:82:ARG:HA	1:A:69:VAL:HG22	1	1.58	1.58
(1,688)	1:A:82:ARG:HA	1:A:69:VAL:HG23	1	1.58	1.58
(1,660)	1:A:44:MET:HE1	1:A:39:GLU:HG2	1	0.3	0.3
(1,660)	1:A:44:MET:HE2	1:A:39:GLU:HG2	1	0.3	0.3
(1,660)	1:A:44:MET:HE3	1:A:39:GLU:HG2	1	0.3	0.3
(1,660)	1:A:44:MET:HE1	1:A:39:GLU:HG3	1	0.3	0.3
(1,660)	1:A:44:MET:HE2	1:A:39:GLU:HG3	1	0.3	0.3
(1,660)	1:A:44:MET:HE3	1:A:39:GLU:HG3	1	0.3	0.3
(1,639)	1:A:85:VAL:H	1:A:85:VAL:HB	1	0.67	0.67



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,615)	1:A:86:LEU:H	1:A:85:VAL:HB	1	0.89	0.89
(1,6)	1:A:12:GLN:HA	1:A:15:ARG:HD2	1	0.21	0.21
(1,6)	1:A:12:GLN:HA	1:A:15:ARG:HD3	1	0.21	0.21
(1,593)	1:A:78:ALA:HA	1:A:69:VAL:HG11	1	1.85	1.85
(1,593)	1:A:78:ALA:HA	1:A:69:VAL:HG12	1	1.85	1.85
(1,593)	1:A:78:ALA:HA	1:A:69:VAL:HG13	1	1.85	1.85
(1,59)	1:A:101:ALA:HB1	1:A:48:LYS:HG2	1	0.16	0.16
(1,59)	1:A:101:ALA:HB1	1:A:48:LYS:HG3	1	0.16	0.16
(1,59)	1:A:101:ALA:HB2	1:A:48:LYS:HG2	1	0.16	0.16
(1,59)	1:A:101:ALA:HB2	1:A:48:LYS:HG3	1	0.16	0.16
(1,59)	1:A:101:ALA:HB3	1:A:48:LYS:HG2	1	0.16	0.16
(1,59)	1:A:101:ALA:HB3	1:A:48:LYS:HG3	1	0.16	0.16
(1,556)	1:A:36:GLU:HG2	1:A:36:GLU:HA	1	0.03	0.03
(1,463)	1:A:69:VAL:H	1:A:69:VAL:HB	1	0.74	0.74
(1,385)	1:A:78:ALA:HB1	1:A:69:VAL:HG11	1	1.6	1.6
(1,385)	1:A:78:ALA:HB1	1:A:69:VAL:HG12	1	1.6	1.6
(1,385)	1:A:78:ALA:HB1	1:A:69:VAL:HG13	1	1.6	1.6
(1,385)	1:A:78:ALA:HB2	1:A:69:VAL:HG11	1	1.6	1.6
(1,385)	1:A:78:ALA:HB2	1:A:69:VAL:HG12	1	1.6	1.6
(1,385)	1:A:78:ALA:HB2	1:A:69:VAL:HG13	1	1.6	1.6
(1,385)	1:A:78:ALA:HB3	1:A:69:VAL:HG11	1	1.6	1.6
(1,385)	1:A:78:ALA:HB3	1:A:69:VAL:HG12	1	1.6	1.6
(1,385)	1:A:78:ALA:HB3	1:A:69:VAL:HG13	1	1.6	1.6
(1,329)	1:A:73:ALA:HB1	1:A:69:VAL:HG11	1	1.58	1.58
(1,329)	1:A:73:ALA:HB1	1:A:69:VAL:HG12	1	1.58	1.58
(1,329)	1:A:73:ALA:HB1	1:A:69:VAL:HG13	1	1.58	1.58
(1,329)	1:A:73:ALA:HB2	1:A:69:VAL:HG11	1	1.58	1.58
(1,329)	1:A:73:ALA:HB2	1:A:69:VAL:HG12	1	1.58	1.58
(1,329)	1:A:73:ALA:HB2	1:A:69:VAL:HG13	1	1.58	1.58
(1,329)	1:A:73:ALA:HB3	1:A:69:VAL:HG11	1	1.58	1.58
(1,329)	1:A:73:ALA:HB3	1:A:69:VAL:HG12	1	1.58	1.58
(1,329)	1:A:73:ALA:HB3	1:A:69:VAL:HG13	1	1.58	1.58
(1,314)	1:A:85:VAL:H	1:A:85:VAL:HG11	1	0.04	0.04
(1,314)	1:A:85:VAL:H	1:A:85:VAL:HG12	1	0.04	0.04
(1,314)	1:A:85:VAL:H	1:A:85:VAL:HG13	1	0.04	0.04
(1,26)	1:A:9:GLU:HA	1:A:9:GLU:HG2	1	0.04	0.04
(1,26)	1:A:9:GLU:HA	1:A:9:GLU:HG3	1	0.04	0.04
(1,231)	1:A:109:GLN:H	1:A:109:GLN:HG3	1	0.1	0.1
(1,204)	1:A:87:LYS:H	1:A:87:LYS:HG3	1	0.86	0.86
(1,1607)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:8:THR:HA	1	0.18	0.18
(1,1607)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:8:THR:HA	1	0.18	0.18
(1,1607)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:8:THR:HA	1	0.18	0.18



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

(1,1607)   1:A:8:THR:HA	Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1607)	(1,1607)	1:A:8:THR:HA	1:A:120:ILE:HD11	1	0.18	0.18
(1,1563) 1:A:89:VAL:HI 1:A:85:VAL:HG11 1 0.2 0.2 (1,1563) 1:A:89:VAL:H 1:A:85:VAL:HG12 1 0.2 0.2 (1,1563) 1:A:89:VAL:H 1:A:85:VAL:HG13 1 0.2 0.2 (1,1553) 1:A:8:THR:HA 1:A:120:ILE:HD11 1 0.28 0.28 (1,1553) 1:A:8:THR:HA 1:A:120:ILE:HD11 1 0.28 0.28 (1,1553) 1:A:8:THR:HA 1:A:120:ILE:HD12 1 0.28 0.28 (1,1553) 1:A:8:THR:HA 1:A:120:ILE:HD13 1 0.28 0.28 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG21 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG21 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG21 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG21 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG21 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 1.49 1.49 1.49 1.49 1.49 1.	(1,1607)	1:A:8:THR:HA	1:A:120:ILE:HD12	1	0.18	0.18
(1,1563) 1:A:89:VAL:H 1:A:85:VAL:HG12 1 0.2 0.2 (1,1563) 1:A:89:VAL:H 1:A:85:VAL:HG13 1 0.2 0.2 (1,1563) 1:A:89:VAL:H 1:A:85:VAL:HG13 1 0.2 0.2 (1,1553) 1:A:8:THR:HA 1:A:120:ILE:HD11 1 0.28 0.28 (1,1553) 1:A:8:THR:HA 1:A:120:ILE:HD12 1 0.28 0.28 (1,1553) 1:A:8:THR:HA 1:A:120:ILE:HD13 1 0.28 0.28 (1,1553) 1:A:8:THR:HA 1:A:120:ILE:HD13 1 0.28 0.28 (1,1553) 1:A:8:THR:HA 1:A:120:ILE:HD13 1 0.28 0.28 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG21 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG21 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG21 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG21 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG21 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG21 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 1.49 (1,1611) 1:A:89:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 1.49 1.49 1.49 1.49 1.49 1.	(1,1607)	1:A:8:THR:HA	1:A:120:ILE:HD13	1	0.18	0.18
(1,1563) 1:A:89:VAL:H 1:A:85:VAL:HG13 1 0.2 0.2 (1,1553) 1:A:8:THR:HA 1:A:120:ILE:HD11 1 0.28 0.28 (1,1553) 1:A:8:THR:HA 1:A:120:ILE:HD12 1 0.28 0.28 (1,1553) 1:A:8:THR:HA 1:A:120:ILE:HD12 1 0.28 0.28 (1,1553) 1:A:8:THR:HA 1:A:120:ILE:HD12 1 0.28 0.28 (1,1553) 1:A:8:THR:HA 1:A:120:ILE:HD13 1 0.28 0.28 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG21 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG21 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG21 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:69:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG21 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG21 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1646) 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,166) 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,166) 1:A:85:VAL:HG14 1 1.A:69:VAL:HG23 1 1.A:80:VAL:HG23 1 0.34 0.34 (1,1496) 1:A:85:VAL:HG11 1 1.A:69:VAL:HG23 1 0.34 0.34 (1,149	(1,1563)	1:A:89:VAL:H	1:A:85:VAL:HG11	1	0.2	0.2
(1,1555)         1:A:8:THR:HA         1:A:120:ILE:HD11         1         0.28         0.28           (1,1553)         1:A:8:THR:HA         1:A:120:ILE:HD12         1         0.28         0.28           (1,1553)         1:A:8:THR:HA         1:A:120:ILE:HD13         1         0.28         0.28           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:69:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49	(1,1563)	1:A:89:VAL:H	1:A:85:VAL:HG12	1	0.2	0.2
(1,1553)         1:A:8:THR:HA         1:A:120:ILE:HD12         1         0.28         0.28           (1,1553)         1:A:8:THR:HA         1:A:120:ILE:HD13         1         0.28         0.28           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG13         1         1.	(1,1563)	1:A:89:VAL:H	1:A:85:VAL:HG13	1	0.2	0.2
(1,1553)         1:A:8:THR:HA         1:A:120:ILE:HD13         1         0.28         0.28           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG13         1	(1,1553)	1:A:8:THR:HA	1:A:120:ILE:HD11	1	0.28	0.28
(1,1511) 1:A:65:VAL:HG21 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG21 1:A:85:VAL:HG12 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG21 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG12 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG12 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG12 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:85:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG21 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG21 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG21 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1611) 1:A:89:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,160) 1:A:82:ARG:H 1:A:69:VAL:HG23 1 1.034 0.34 (1,1496) 1:A:82:ARG:H 1:A:69:VAL:HG23 1 1.17 1.17 (1,1466) 1:A:82:ARG:H 1:A:69:VAL:HG23 1 1.17 1.17 (1,1466) 1:A:85:VAL:HG11 1 1.17 1.17 (1,1466) 1:A:85:VAL:HG11 1:A:69:VAL:HG23 1 1.17 1.17 (1,1466) 1:A:85:VAL:HG11 1:A:69:VAL:HG23 1 1.17 1.17 (1,1466) 1:A:68:LEU:HG 1:A:85:VAL:HG11 1 1.17 1.17 (1,1466) 1:A:68:LEU:HG 1:A:85:VAL:HG11 1 1.17 1.17 (1,1466) 1:A:68:LEU:HG 1:A:85:VAL:HG13 1 1.17 1.17 (1,1466) 1:A:68:LEU:HG 1:A:85:VAL:HG13 1 1.17 1.17 (1,1466) 1:A:68:LEU:HG 1:A:85:VAL:HG13 1 0.22 0.22 (1,1417) 1:A:4	(1,1553)	1:A:8:THR:HA	1:A:120:ILE:HD12	1	0.28	0.28
(1,1511) 1:A:65:VAL:HG21 1:A:85:VAL:HG12 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG12 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG12 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG12 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:65:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG21 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG11 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1511) 1:A:89:VAL:HG23 1:A:85:VAL:HG13 1 1.49 1.49 (1,1496) 1:A:82:ARG:H 1:A:69:VAL:HG23 1 1.3:40:VAL:HG23 1 1.4:40:VAL:HG23 1 1.4:40:VAL:HG2	(1,1553)	1:A:8:THR:HA	1:A:120:ILE:HD13	1	0.28	0.28
(1,1511)         1:A:65:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1 <t< td=""><td>(1,1511)</td><td>1:A:65:VAL:HG21</td><td>1:A:85:VAL:HG11</td><td>1</td><td>1.49</td><td>1.49</td></t<>	(1,1511)	1:A:65:VAL:HG21	1:A:85:VAL:HG11	1	1.49	1.49
(1,1511)         1:A:65:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG12         1 <t< td=""><td>(1,1511)</td><td>1:A:65:VAL:HG21</td><td>1:A:85:VAL:HG12</td><td>1</td><td>1.49</td><td>1.49</td></t<>	(1,1511)	1:A:65:VAL:HG21	1:A:85:VAL:HG12	1	1.49	1.49
(1,1511)         1:A:65:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1 <t< td=""><td>(1,1511)</td><td>1:A:65:VAL:HG21</td><td>1:A:85:VAL:HG13</td><td>1</td><td>1.49</td><td>1.49</td></t<>	(1,1511)	1:A:65:VAL:HG21	1:A:85:VAL:HG13	1	1.49	1.49
(1,1511)         1:A:65:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1 <t< td=""><td>(1,1511)</td><td>1:A:65:VAL:HG22</td><td>1:A:85:VAL:HG11</td><td>1</td><td>1.49</td><td>1.49</td></t<>	(1,1511)	1:A:65:VAL:HG22	1:A:85:VAL:HG11	1	1.49	1.49
(1,1511)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1 <t< td=""><td>(1,1511)</td><td>1:A:65:VAL:HG22</td><td>1:A:85:VAL:HG12</td><td>1</td><td>1.49</td><td>1.49</td></t<>	(1,1511)	1:A:65:VAL:HG22	1:A:85:VAL:HG12	1	1.49	1.49
(1,1511)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1496)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG12         1         0.34         0.34           (1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG22         1         0	(1,1511)	1:A:65:VAL:HG22	1:A:85:VAL:HG13	1	1.49	1.49
(1,1511)         1:A:65:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG21         1         0.34         0.34           (1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG23         1         0.34	(1,1511)	1:A:65:VAL:HG23	1:A:85:VAL:HG11	1	1.49	1.49
(1,1511)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG21         1         0.34         0.34           (1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG23         1         0.34         0.34           (1,1481)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG23         1         0.34 <td>(1,1511)</td> <td>1:A:65:VAL:HG23</td> <td>1:A:85:VAL:HG12</td> <td>1</td> <td>1.49</td> <td>1.49</td>	(1,1511)	1:A:65:VAL:HG23	1:A:85:VAL:HG12	1	1.49	1.49
(1,1511)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1496)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG22         1         0.34         0.34           (1,1481)         1:A:87:LYS:HB2         1:A:84:GLU:HA         1         0.23         0.23           (1,1481)         1:A:85:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HB2         1         1.17<	(1,1511)	1:A:65:VAL:HG23	1:A:85:VAL:HG13	1	1.49	1.49
(1,1511)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1496)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG22         1         0.34         0.34           (1,1496)         1:A:87:LYS:HB2         1:A:69:VAL:HG23         1         0.34         0.34           (1,1481)         1:A:87:LYS:HB3         1:A:84:GLU:HA         1         0.23         0.23           (1,1466)         1:A:85:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HB2         1         1.17 </td <td>(1,1511)</td> <td>1:A:89:VAL:HG21</td> <td>1:A:85:VAL:HG11</td> <td>1</td> <td>1.49</td> <td>1.49</td>	(1,1511)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:85:VAL:HG11	1	1.49	1.49
(1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1496)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG22         1         0.34         0.34           (1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG23         1         0.34         0.34           (1,1481)         1:A:87:LYS:HB2         1:A:84:GLU:HA         1         0.23         0.23           (1,1481)         1:A:87:LYS:HB3         1:A:84:GLU:HA         1         0.23         0.23           (1,1466)         1:A:85:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HB2         1         1.17	(1,1511)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:85:VAL:HG12	1	1.49	1.49
(1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG21         1         0.34         0.34           (1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG22         1         0.34         0.34           (1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG23         1         0.34         0.34           (1,1496)         1:A:87:LYS:HB2         1:A:84:GLU:HA         1         0.23         0.23           (1,1481)         1:A:87:LYS:HB3         1:A:84:GLU:HA         1         0.23         0.23           (1,1466)         1:A:85:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HB2         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:68:LEU:HG         1:A:85:VAL:HG11         1         1.17	(1,1511)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:85:VAL:HG13	1	1.49	1.49
(1,1511)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG21         1         0.34         0.34           (1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG22         1         0.34         0.34           (1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG23         1         0.34         0.34           (1,1496)         1:A:87:LYS:HB2         1:A:84:GLU:HA         1         0.23         0.23           (1,1481)         1:A:87:LYS:HB3         1:A:84:GLU:HA         1         0.23         0.23           (1,1481)         1:A:85:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HB2         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:85:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HB2         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:68:LEU:HG         1:A:85:VAL:HG11         1         1.17	(1,1511)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:85:VAL:HG11	1	1.49	1.49
(1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG11         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG21         1         0.34         0.34           (1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG22         1         0.34         0.34           (1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG23         1         0.34         0.34           (1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG23         1         0.34         0.34           (1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG23         1         0.34         0.34           (1,1481)         1:A:87:LYS:HB2         1:A:84:GLU:HA         1         0.23         0.23           (1,1481)         1:A:87:LYS:HB3         1:A:84:GLU:HA         1         0.23         0.23           (1,1466)         1:A:85:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HB2         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:68:LEU:HG         1:A:85:VAL:HG11         1         1.17	(1,1511)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:85:VAL:HG12	1	1.49	1.49
(1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG12         1         1.49         1.49           (1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG21         1         0.34         0.34           (1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG22         1         0.34         0.34           (1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG23         1         0.34         0.34           (1,1481)         1:A:87:LYS:HB2         1:A:84:GLU:HA         1         0.23         0.23           (1,1481)         1:A:87:LYS:HB3         1:A:84:GLU:HA         1         0.23         0.23           (1,1466)         1:A:85:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HB2         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:85:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HB2         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:68:LEU:HG         1:A:85:VAL:HG11         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:68:LEU:HG         1:A:85:VAL:HG13         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:68:LEU:HG         1:A:85:VAL:HG13         1         1.17 <td< td=""><td>(1,1511)</td><td>1:A:89:VAL:HG22</td><td>1:A:85:VAL:HG13</td><td>1</td><td>1.49</td><td>1.49</td></td<>	(1,1511)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:85:VAL:HG13	1	1.49	1.49
(1,1511)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HG13         1         1.49         1.49           (1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG21         1         0.34         0.34           (1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG22         1         0.34         0.34           (1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG23         1         0.34         0.34           (1,1481)         1:A:87:LYS:HB2         1:A:84:GLU:HA         1         0.23         0.23           (1,1481)         1:A:87:LYS:HB3         1:A:84:GLU:HA         1         0.23         0.23           (1,1466)         1:A:85:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HB2         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:85:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HB2         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:68:LEU:HG         1:A:63:PRO:HB2         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:68:LEU:HG         1:A:85:VAL:HG11         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:68:LEU:HG         1:A:85:VAL:HG12         1         1.17         1.17           (1,1417)         1:A:44:MET:HE1         1:A:39:GLU:HG3         1         0.22         0.	(1,1511)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:85:VAL:HG11	1	1.49	1.49
(1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG21         1         0.34         0.34           (1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG22         1         0.34         0.34           (1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG23         1         0.34         0.34           (1,1481)         1:A:87:LYS:HB2         1:A:84:GLU:HA         1         0.23         0.23           (1,1481)         1:A:87:LYS:HB3         1:A:84:GLU:HA         1         0.23         0.23           (1,1481)         1:A:85:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HB2         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:85:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HB2         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:85:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HB2         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:68:LEU:HG         1:A:85:VAL:HG11         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:68:LEU:HG         1:A:85:VAL:HG13         1         1.17         1.17           (1,1417)         1:A:44:MET:HE1         1:A:39:GLU:HG3         1         0.22         0.22           (1,1417)         1:A:44:MET:HE2         1:A:39:GLU:HG3         1         0.22         0.	(1,1511)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:85:VAL:HG12	1	1.49	1.49
(1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG22         1         0.34         0.34           (1,1496)         1:A:82:ARG:H         1:A:69:VAL:HG23         1         0.34         0.34           (1,1481)         1:A:87:LYS:HB2         1:A:84:GLU:HA         1         0.23         0.23           (1,1481)         1:A:87:LYS:HB3         1:A:84:GLU:HA         1         0.23         0.23           (1,1466)         1:A:85:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HB2         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:85:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HB2         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:85:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HB2         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:68:LEU:HG         1:A:85:VAL:HG11         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:68:LEU:HG         1:A:85:VAL:HG12         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:68:LEU:HG         1:A:85:VAL:HG13         1         1.17         1.17           (1,1417)         1:A:44:MET:HE1         1:A:39:GLU:HG3         1         0.22         0.22           (1,1417)         1:A:44:MET:HE3         1:A:39:GLU:HG3         1         0.22         0	(1,1511)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:85:VAL:HG13	1	1.49	1.49
(1,1496)       1:A:82:ARG:H       1:A:69:VAL:HG23       1       0.34       0.34         (1,1481)       1:A:87:LYS:HB2       1:A:84:GLU:HA       1       0.23       0.23         (1,1481)       1:A:87:LYS:HB3       1:A:84:GLU:HA       1       0.23       0.23         (1,1466)       1:A:85:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HB2       1       1.17       1.17         (1,1466)       1:A:85:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HB2       1       1.17       1.17         (1,1466)       1:A:68:LEU:HG       1:A:85:VAL:HG11       1       1.17       1.17         (1,1466)       1:A:68:LEU:HG       1:A:85:VAL:HG12       1       1.17       1.17         (1,1466)       1:A:68:LEU:HG       1:A:85:VAL:HG13       1       1.17       1.17         (1,1466)       1:A:68:LEU:HG       1:A:85:VAL:HG13       1       0.22       0.22         (1,1417)       1:A:44:MET:HE1       1:A:39:GLU:HG3       1       0.22       0.22         (1,1417)       1:A:44:MET:HE3       1:A:39:GLU:HG3       1       0.22       0.22         (1,1417)       1:A:44:MET:HE3       1:A:39:GLU:HG3       1       0.22       0.22	(1,1496)	1:A:82:ARG:H	1:A:69:VAL:HG21	1	0.34	0.34
(1,1481)         1:A:87:LYS:HB2         1:A:84:GLU:HA         1         0.23         0.23           (1,1481)         1:A:87:LYS:HB3         1:A:84:GLU:HA         1         0.23         0.23           (1,1466)         1:A:85:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HB2         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:85:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HB2         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:85:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HB2         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:68:LEU:HG         1:A:85:VAL:HG11         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:68:LEU:HG         1:A:85:VAL:HG12         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:68:LEU:HG         1:A:85:VAL:HG13         1         1.17         1.17           (1,1417)         1:A:44:MET:HE1         1:A:39:GLU:HG3         1         0.22         0.22           (1,1417)         1:A:44:MET:HE3         1:A:39:GLU:HG3         1         0.22         0.22           (1,1417)         1:A:44:MET:HE3         1:A:39:GLU:HG3         1         0.22         0.22	(1,1496)	1:A:82:ARG:H	1:A:69:VAL:HG22	1	0.34	0.34
(1,1481)         1:A:87:LYS:HB2         1:A:84:GLU:HA         1         0.23         0.23           (1,1481)         1:A:87:LYS:HB3         1:A:84:GLU:HA         1         0.23         0.23           (1,1466)         1:A:85:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HB2         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:85:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HB2         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:85:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HB2         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:68:LEU:HG         1:A:85:VAL:HG11         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:68:LEU:HG         1:A:85:VAL:HG12         1         1.17         1.17           (1,1466)         1:A:68:LEU:HG         1:A:85:VAL:HG13         1         1.17         1.17           (1,1417)         1:A:44:MET:HE1         1:A:39:GLU:HG3         1         0.22         0.22           (1,1417)         1:A:44:MET:HE3         1:A:39:GLU:HG3         1         0.22         0.22           (1,1417)         1:A:44:MET:HE3         1:A:39:GLU:HG3         1         0.22         0.22	(1,1496)	1:A:82:ARG:H	1:A:69:VAL:HG23	1	0.34	0.34
(1,1481)       1:A:87:LYS:HB3       1:A:84:GLU:HA       1       0.23       0.23         (1,1466)       1:A:85:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HB2       1       1.17       1.17         (1,1466)       1:A:85:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HB2       1       1.17       1.17         (1,1466)       1:A:85:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HB2       1       1.17       1.17         (1,1466)       1:A:68:LEU:HG       1:A:85:VAL:HG11       1       1.17       1.17         (1,1466)       1:A:68:LEU:HG       1:A:85:VAL:HG12       1       1.17       1.17         (1,1466)       1:A:68:LEU:HG       1:A:85:VAL:HG13       1       1.17       1.17         (1,1417)       1:A:44:MET:HE1       1:A:39:GLU:HG3       1       0.22       0.22         (1,1417)       1:A:44:MET:HE3       1:A:39:GLU:HG3       1       0.22       0.22         (1,1417)       1:A:44:MET:HE3       1:A:39:GLU:HG3       1       0.22       0.22		1:A:87:LYS:HB2	1:A:84:GLU:HA	1	0.23	0.23
(1,1466)       1:A:85:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HB2       1       1.17       1.17         (1,1466)       1:A:85:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HB2       1       1.17       1.17         (1,1466)       1:A:85:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HB2       1       1.17       1.17         (1,1466)       1:A:68:LEU:HG       1:A:85:VAL:HG11       1       1.17       1.17         (1,1466)       1:A:68:LEU:HG       1:A:85:VAL:HG12       1       1.17       1.17         (1,1466)       1:A:68:LEU:HG       1:A:85:VAL:HG13       1       1.17       1.17         (1,1417)       1:A:44:MET:HE1       1:A:39:GLU:HG3       1       0.22       0.22         (1,1417)       1:A:44:MET:HE3       1:A:39:GLU:HG3       1       0.22       0.22         (1,1417)       1:A:44:MET:HE3       1:A:39:GLU:HG3       1       0.22       0.22	(1,1481)	1:A:87:LYS:HB3	1:A:84:GLU:HA		0.23	0.23
(1,1466)       1:A:85:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HB2       1       1.17       1.17         (1,1466)       1:A:85:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HB2       1       1.17       1.17         (1,1466)       1:A:68:LEU:HG       1:A:85:VAL:HG11       1       1.17       1.17         (1,1466)       1:A:68:LEU:HG       1:A:85:VAL:HG12       1       1.17       1.17         (1,1466)       1:A:68:LEU:HG       1:A:85:VAL:HG13       1       1.17       1.17         (1,1417)       1:A:44:MET:HE1       1:A:39:GLU:HG3       1       0.22       0.22         (1,1417)       1:A:44:MET:HE2       1:A:39:GLU:HG3       1       0.22       0.22         (1,1417)       1:A:44:MET:HE3       1:A:39:GLU:HG3       1       0.22       0.22	/	1:A:85:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HB2	1	1.17	1.17
(1,1466)       1:A:85:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HB2       1       1.17       1.17         (1,1466)       1:A:68:LEU:HG       1:A:85:VAL:HG11       1       1.17       1.17         (1,1466)       1:A:68:LEU:HG       1:A:85:VAL:HG12       1       1.17       1.17         (1,1466)       1:A:68:LEU:HG       1:A:85:VAL:HG13       1       1.17       1.17         (1,1417)       1:A:44:MET:HE1       1:A:39:GLU:HG3       1       0.22       0.22         (1,1417)       1:A:44:MET:HE3       1:A:39:GLU:HG3       1       0.22       0.22         (1,1417)       1:A:44:MET:HE3       1:A:39:GLU:HG3       1       0.22       0.22	· · /	1:A:85:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HB2	1	1.17	1.17
(1,1466)       1:A:68:LEU:HG       1:A:85:VAL:HG11       1       1.17       1.17         (1,1466)       1:A:68:LEU:HG       1:A:85:VAL:HG12       1       1.17       1.17         (1,1466)       1:A:68:LEU:HG       1:A:85:VAL:HG13       1       1.17       1.17         (1,1417)       1:A:44:MET:HE1       1:A:39:GLU:HG3       1       0.22       0.22         (1,1417)       1:A:44:MET:HE2       1:A:39:GLU:HG3       1       0.22       0.22         (1,1417)       1:A:44:MET:HE3       1:A:39:GLU:HG3       1       0.22       0.22		1:A:85:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HB2	1	1.17	1.17
(1,1466)       1:A:68:LEU:HG       1:A:85:VAL:HG12       1       1.17       1.17         (1,1466)       1:A:68:LEU:HG       1:A:85:VAL:HG13       1       1.17       1.17         (1,1417)       1:A:44:MET:HE1       1:A:39:GLU:HG3       1       0.22       0.22         (1,1417)       1:A:44:MET:HE2       1:A:39:GLU:HG3       1       0.22       0.22         (1,1417)       1:A:44:MET:HE3       1:A:39:GLU:HG3       1       0.22       0.22	(1,1466)	1:A:68:LEU:HG	1:A:85:VAL:HG11	1	1.17	1.17
(1,1466)       1:A:68:LEU:HG       1:A:85:VAL:HG13       1       1.17       1.17         (1,1417)       1:A:44:MET:HE1       1:A:39:GLU:HG3       1       0.22       0.22         (1,1417)       1:A:44:MET:HE2       1:A:39:GLU:HG3       1       0.22       0.22         (1,1417)       1:A:44:MET:HE3       1:A:39:GLU:HG3       1       0.22       0.22	(1,1466)	1:A:68:LEU:HG	1:A:85:VAL:HG12	1	1.17	1.17
(1,1417)       1:A:44:MET:HE1       1:A:39:GLU:HG3       1       0.22       0.22         (1,1417)       1:A:44:MET:HE2       1:A:39:GLU:HG3       1       0.22       0.22         (1,1417)       1:A:44:MET:HE3       1:A:39:GLU:HG3       1       0.22       0.22	· · /	1:A:68:LEU:HG	1:A:85:VAL:HG13	1	1.17	1.17
(1,1417)       1:A:44:MET:HE2       1:A:39:GLU:HG3       1       0.22       0.22         (1,1417)       1:A:44:MET:HE3       1:A:39:GLU:HG3       1       0.22       0.22		1:A:44:MET:HE1	1:A:39:GLU:HG3		0.22	0.22
(1,1417) 1:A:44:MET:HE3 1:A:39:GLU:HG3 1 0.22 0.22	, ,		1:A:39:GLU:HG3	1	0.22	0.22
	( ' /	1:A:44:MET:HE3	1:A:39:GLU:HG3		0.22	0.22
	(1,139)					



## Continued from previous page...

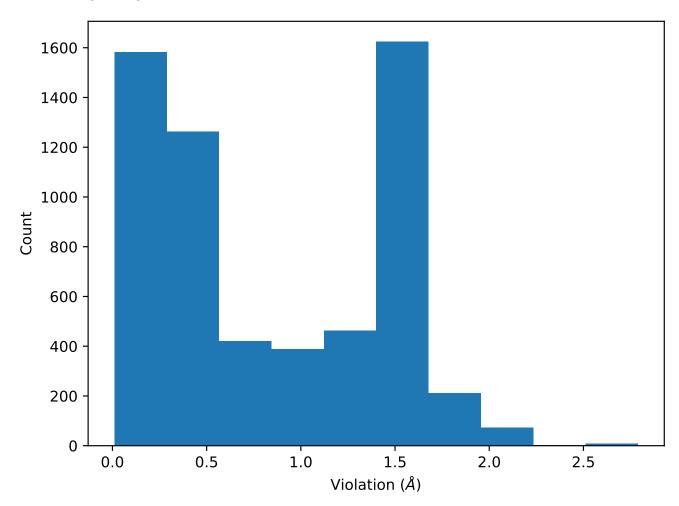
Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1364)	1:A:20:SER:H	1:A:16:THR:HA	1	0.12	0.12
(1,1325)	1:A:98:CYS:HA	1:A:48:LYS:HG2	1	0.02	0.02
(1,1325)	1:A:98:CYS:HA	1:A:48:LYS:HG3	1	0.02	0.02
(1,1308)	1:A:13:ARG:HA	1:A:13:ARG:HG3	1	0.5	0.5
(1,1199)	1:A:85:VAL:H	1:A:85:VAL:HG21	1	0.11	0.11
(1,1199)	1:A:85:VAL:H	1:A:85:VAL:HG22	1	0.11	0.11
(1,1199)	1:A:85:VAL:H	1:A:85:VAL:HG23	1	0.11	0.11
(1,1148)	1:A:16:THR:H	1:A:15:ARG:HB2	1	0.04	0.04
(1,1148)	1:A:16:THR:H	1:A:15:ARG:HB3	1	0.04	0.04
(1,1144)	1:A:85:VAL:HA	1:A:85:VAL:HG21	1	0.4	0.4
(1,1144)	1:A:85:VAL:HA	1:A:85:VAL:HG22	1	0.4	0.4
(1,1144)	1:A:85:VAL:HA	1:A:85:VAL:HG23	1	0.4	0.4
(1,1093)	1:A:39:GLU:H	1:A:39:GLU:HB3	1	0.34	0.34
(1,10)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:69:VAL:HG21	1	0.73	0.73
(1,10)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:69:VAL:HG22	1	0.73	0.73
(1,10)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:69:VAL:HG23	1	0.73	0.73



#### 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)
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	18	2.79
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	18	2.79
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	18	2.79
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	18	2.79
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	18	2.79
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	18	2.79
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	18	2.79



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	18	2.79
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	18	2.79
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	9	2.27
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	9	2.27
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	9	2.27
(1,1578)	1:A:30:GLU:HG3	1:A:27:ASP:HA	9	2.23
(1,194)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:6:SER:HB2	9	2.22
(1,194)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:6:SER:HB2	9	2.22
(1,194)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:6:SER:HB2	28	2.19
(1,194)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:6:SER:HB2	28	2.19
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	18	2.15
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	18	2.15
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	18	2.15
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	18	2.15
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	18	2.15
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	18	2.15
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	24	2.1
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	24	2.1
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	24	2.1
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	24	2.1
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	24	2.1
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	24	2.1
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	5	2.08
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	5	2.08
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	5	2.08
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	5	2.08
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	5	2.08
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	5	2.08
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	20	2.07
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	20	2.07
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	20	2.07
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	20	2.07
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	20	2.07
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	20	2.07
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	9	2.03
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	9	2.03
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	9	2.03
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	9	2.03
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	9	2.03
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	9	2.03
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	17	2.03
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	17	2.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	17	2.03
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	17	2.03
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	17	2.03
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	17	2.03
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	14	2.02
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	14	2.02
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	14	2.02
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	14	2.02
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	14	2.02
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	14	2.02
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	2	2.0
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	2	2.0
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	2	2.0
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	2	2.0
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	2	2.0
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	2	2.0
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	23	2.0
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	23	2.0
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	23	2.0
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	23	2.0
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	23	2.0
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	23	2.0
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	19	1.98
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	19	1.98
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	19	1.98
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	19	1.98
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	19	1.98
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	19	1.98
(1,617)	1:A:50:VAL:HB	1:A:47:ILE:HA	28	1.98
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	5	1.98
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	4	1.97
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	4	1.97
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	4	1.97
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	4	1.97
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	4	1.97
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	4	1.97
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	3	1.94
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	3	1.94
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	3	1.94
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	3	1.94
(1.052)				4.04
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23 1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	3	1.94



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1483)	1:A:111:ASN:HD22	1:A:110:LYS:HE2	8	1.94
(1,1483)	1:A:111:ASN:HD22	1:A:110:LYS:HE3	8	1.94
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	28	1.93
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	28	1.93
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	28	1.93
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	28	1.93
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	28	1.93
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	28	1.93
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	11	1.93
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	11	1.93
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	11	1.93
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	11	1.93
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	11	1.93
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	11	1.93
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	22	1.92
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	22	1.92
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	22	1.92
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	22	1.92
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	22	1.92
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	22	1.92
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	27	1.92
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	27	1.92
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	27	1.92
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	27	1.92
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	27	1.92
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	27	1.92
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD21	7	1.92
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD22	7	1.92
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD23	7	1.92
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	11	1.9
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	11	1.9
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	11	1.9
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	11	1.9
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	11	1.9
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	11	1.9
(1,617)	1:A:50:VAL:HB	1:A:47:ILE:HA	18	1.9
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	8	1.9
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	8	1.9
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	8	1.9
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	8	1.9
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	8	1.9
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	8	1.9



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	14	1.89
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	14	1.89
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	14	1.89
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	14	1.89
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	14	1.89
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	14	1.89
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	8	1.87
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	8	1.87
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	8	1.87
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	8	1.87
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	8	1.87
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	8	1.87
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	15	1.85
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	15	1.85
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	15	1.85
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	15	1.85
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	15	1.85
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	15	1.85
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	21	1.85
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	21	1.85
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	21	1.85
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	21	1.85
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	21	1.85
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	21	1.85
(1,593)	1:A:78:ALA:HA	1:A:69:VAL:HG11	1	1.85
(1,593)	1:A:78:ALA:HA	1:A:69:VAL:HG12	1	1.85
(1,593)	1:A:78:ALA:HA	1:A:69:VAL:HG13	1	1.85
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	10	1.84
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	10	1.84
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	10	1.84
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	10	1.84
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	10	1.84
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	10	1.84
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD21	13	1.83
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD22	13	1.83
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD23	13	1.83
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	29	1.82
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	29	1.82
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	29	1.82
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	29	1.82
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	29	1.82
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	29	1.82



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

(1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE1 26 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE2 26 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE1 26 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE1 26 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 26 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE2 26 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 26 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE1 30 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE2 30 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE1 30 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE2 30 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE2 30 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE2 30 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 30 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 30 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 25 1.79 (1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE1 25 1.79 (1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE1 25 1.79 (1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE1 25 1.79 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE1 25 1.79 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE1 25 1.79 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 3 1.77 (1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE1 13 1.77 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE1 17 1.76 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 17 1.76 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 17 1.76 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 17 1.76 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE1 17 1.76 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 17	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE1 26 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 26 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE2 26 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE2 26 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE2 26 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE1 30 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE1 30 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE2 30 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE1 30 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE2 30 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE2 30 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE2 30 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE1 25 1.79 (1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE2 25 1.79 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE2 25 1.79 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE2 25 1.79 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE2 25 1.79 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE2 25 1.79 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 25 1.79 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 25 1.79 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 25 1.79 (1,797) 1:A:82:ARG:HA 1:A:65:VAL:HG11 6 1.79 (1,797) 1:A:82:ARG:HA 1:A:65:VAL:HG13 6 1.79 (1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE1 13 1.77 (1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE1 13 1.77 (1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE1 13 1.77 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE1 13 1.77 (1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE1 13 1.77 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE1 17 1.76 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE1	(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	26	1.8
(1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE2 26 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 26 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE2 26 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE2 26 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE2 30 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE2 30 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE1 30 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE1 30 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 25 1.79 (1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE1 25 1.79 (1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE1 25 1.79 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE1 25 1.79 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 25 1.79 (1,797) 1:A:82:ARG:HA 1:A:65:VAL:HG11 6 1.79 (1,797) 1:A:82:ARG:HA 1:A:65:VAL:HG12 6 1.79 (1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE1 13 1.77 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE1 13 1.77 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE1 13 1.77 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE1 13 1.77 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 17 1.76 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 17 1.76 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 17 1.76 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 7 1.76 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 7 1.76 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1	(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	26	1.8
(1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 26 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE1 30 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE1 30 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE1 30 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE1 30 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE1 30 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE1 30 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE2 30 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE2 30 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE2 30 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 30 1.8 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 25 1.79 (1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE1 25 1.79 (1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE1 25 1.79 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE2 25 1.79 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE2 25 1.79 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE2 25 1.79 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 13 1.77 (1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE1 13 1.77 (1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE1 13 1.77 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE1 13 1.77 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE1 13 1.77 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 13 1.77 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 13 1.77 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 13 1.77 (1,960) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE1 17 1.76 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 17 1.76 (1,960) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 17 1.76 (1,960) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 17 1.76 (1,960) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE1 17 1.76 (1,952) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:3:PHE:HE1 17 1.76 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 7 1.76 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:HE1 7 1.76 (1,952) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:3:PHE:H	(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	26	1.8
(1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         30         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         30         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2         30         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE1         30         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         30         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         30         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         30         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG1         6 <td>(1,952)</td> <td>1:A:5:VAL:HG22</td> <td>1:A:3:PHE:HE2</td> <td>26</td> <td>1.8</td>	(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	26	1.8
(1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         30         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2         30         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE1         30         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE2         30         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         30         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         30         1.8           (1,464)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2         30         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:6:VAL:HG11         6         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:6:VAL:HG12         6 <td>(1,952)</td> <td>1:A:5:VAL:HG23</td> <td>1:A:3:PHE:HE1</td> <td>26</td> <td>1.8</td>	(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	26	1.8
(1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2         30         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE1         30         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE2         30         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         30         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         30         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         30         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG11         6         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG13         6 </td <td>(1,952)</td> <td>1:A:5:VAL:HG23</td> <td>1:A:3:PHE:HE2</td> <td>26</td> <td>1.8</td>	(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	26	1.8
(1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE1         30         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE2         30         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         30         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         30         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         30         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:6:VAL:HG11         6         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:6:VAL:HG11         6         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:6:VAL:HG12         6         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         13 <td>(1,952)</td> <td>1:A:5:VAL:HG21</td> <td>1:A:3:PHE:HE1</td> <td>30</td> <td>1.8</td>	(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	30	1.8
(1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE2         30         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         30         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         30         1.8           (1,464)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2         30         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG11         6         1.79           (1,797)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2         13	(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	30	1.8
(1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         30         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         30         1.8           (1,464)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG11         6         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG12         6         1.79           (1,797)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE1	(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	30	1.8
(1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         30         1.8           (1,464)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:64:LEU:HG         13         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG11         6         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG13         6         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1	(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	30	1.8
(1,464)         1:A:57:PHE:HA         1:A:64:LEU:HG         13         1.8           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG12         6         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG13         6         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD1	(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	30	1.8
(1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG11         6         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG13         6         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HD1 <t< td=""><td>(1,952)</td><td>1:A:5:VAL:HG23</td><td>1:A:3:PHE:HE2</td><td>30</td><td>1.8</td></t<>	(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	30	1.8
(1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG11         6         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG12         6         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG13         6         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HD1 <td< td=""><td>(1,464)</td><td>1:A:57:PHE:HA</td><td>1:A:64:LEU:HG</td><td>13</td><td>1.8</td></td<>	(1,464)	1:A:57:PHE:HA	1:A:64:LEU:HG	13	1.8
(1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG11         6         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG12         6         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG13         6         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG13         6         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HD1 <td< td=""><td>(1,952)</td><td>1:A:5:VAL:HG21</td><td>1:A:3:PHE:HE1</td><td>25</td><td>1.79</td></td<>	(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	25	1.79
(1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG11         6         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG12         6         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG13         6         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HD1 <t< td=""><td>(1,952)</td><td>1:A:5:VAL:HG21</td><td>1:A:3:PHE:HE2</td><td>25</td><td>1.79</td></t<>	(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	25	1.79
(1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         25         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG11         6         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG12         6         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG13         6         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HD1 <t< td=""><td>(1,952)</td><td>1:A:5:VAL:HG22</td><td>1:A:3:PHE:HE1</td><td>25</td><td>1.79</td></t<>	(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	25	1.79
(1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         25         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG11         6         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG12         6         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG13         6         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD1 <t< td=""><td>(1,952)</td><td>1:A:5:VAL:HG22</td><td>1:A:3:PHE:HE2</td><td>25</td><td>1.79</td></t<>	(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	25	1.79
(1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG11         6         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG12         6         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG13         6         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,960)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD1 <t< td=""><td>(1,952)</td><td>1:A:5:VAL:HG23</td><td>1:A:3:PHE:HE1</td><td>25</td><td>1.79</td></t<>	(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	25	1.79
(1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG12         6         1.79           (1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG13         6         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         7         1.76           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2 <th< td=""><td>(1,952)</td><td>1:A:5:VAL:HG23</td><td>1:A:3:PHE:HE2</td><td>25</td><td>1.79</td></th<>	(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	25	1.79
(1,797)         1:A:82:ARG:HA         1:A:65:VAL:HG13         6         1.79           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         7         1.76           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2 <td< td=""><td>(1,797)</td><td>1:A:82:ARG:HA</td><td>1:A:65:VAL:HG11</td><td>6</td><td>1.79</td></td<>	(1,797)	1:A:82:ARG:HA	1:A:65:VAL:HG11	6	1.79
(1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HD2         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HD1         7         1.76           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1 <td< td=""><td>(1,797)</td><td>1:A:82:ARG:HA</td><td>1:A:65:VAL:HG12</td><td>6</td><td>1.79</td></td<>	(1,797)	1:A:82:ARG:HA	1:A:65:VAL:HG12	6	1.79
(1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HD2         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HD2         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD2         28         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         7         1.76           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2         7         1.76           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2	(1,797)	1:A:82:ARG:HA	1:A:65:VAL:HG13	6	1.79
(1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HD2         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD2         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD2         28         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         7         1.76           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         7         1.76           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         7         1.76           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         7	(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	13	1.77
(1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HD2         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD2         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD2         28         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         7         1.76           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         7         1.76           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         7         1.76           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         7         1.76           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         7<	(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	13	1.77
(1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         13         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HD2         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HD2         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD2         28         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         7         1.76           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         7         1.76           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         7 </td <td>(1,952)</td> <td>1:A:5:VAL:HG22</td> <td>1:A:3:PHE:HE1</td> <td>13</td> <td>1.77</td>	(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	13	1.77
(1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         13         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HD2         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD2         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD2         28         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         7         1.76           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         7         1.76           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE2         7         1.76           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         7         1.76           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         7         1.76           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         7         1.76           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         10 </td <td>(1,952)</td> <td>1:A:5:VAL:HG22</td> <td>1:A:3:PHE:HE2</td> <td>13</td> <td>1.77</td>	(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	13	1.77
(1,496)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HD2         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HD2         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD1         28         1.77           (1,496)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HD2         28         1.77           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         7         1.76           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE2         7         1.76           (1,952)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:3:PHE:HE1         7         1.76           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         7         1.76           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE2         7         1.76           (1,952)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:3:PHE:HE1         7         1.76           (1,952)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:3:PHE:HE1         10         1.76	(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	13	1.77
(1,496)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:3:PHE:HD2       28       1.77         (1,496)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:3:PHE:HD1       28       1.77         (1,496)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:3:PHE:HD2       28       1.77         (1,496)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HD1       28       1.77         (1,496)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HD2       28       1.77         (1,952)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:3:PHE:HE2       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE2       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:3:PHE:HE1       10       1.76	(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	13	1.77
(1,496)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:3:PHE:HD1       28       1.77         (1,496)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:3:PHE:HD2       28       1.77         (1,496)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HD1       28       1.77         (1,496)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HD2       28       1.77         (1,952)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:3:PHE:HE2       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE2       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:3:PHE:HE1       10       1.76	(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	28	1.77
(1,496)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:3:PHE:HD2       28       1.77         (1,496)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HD1       28       1.77         (1,496)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HD2       28       1.77         (1,952)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:3:PHE:HE2       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE2       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE1       10       1.76	(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	28	1.77
(1,496)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HD1       28       1.77         (1,496)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HD2       28       1.77         (1,952)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:3:PHE:HE2       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:3:PHE:HE2       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE2       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE2       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:3:PHE:HE1       10       1.76	(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	28	1.77
(1,496)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HD2       28       1.77         (1,952)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:3:PHE:HE2       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:3:PHE:HE2       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE2       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE2       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:3:PHE:HE1       10       1.76	(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	28	1.77
(1,496)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HD2       28       1.77         (1,952)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:3:PHE:HE2       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:3:PHE:HE2       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE2       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE2       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:3:PHE:HE1       10       1.76	` '	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	28	1.77
(1,952)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:3:PHE:HE2       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:3:PHE:HE2       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE2       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:3:PHE:HE1       10       1.76	· · /	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	28	1.77
(1,952)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:3:PHE:HE2       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE2       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:3:PHE:HE1       10       1.76	/	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	7	1.76
(1,952)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:3:PHE:HE2       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE2       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:3:PHE:HE1       10       1.76	(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	7	1.76
(1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE1       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE2       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:3:PHE:HE1       10       1.76	(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	7	1.76
(1,952)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:3:PHE:HE2       7       1.76         (1,952)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:3:PHE:HE1       10       1.76	(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	7	1.76
(1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE1 10 1.76	(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	7	1.76
	(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	7	1.76
(1,952) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:3:PHE:HE2 10 1.76	(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	10	1.76
	(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	10	1.76



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	10	1.76
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	10	1.76
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	10	1.76
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	10	1.76
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	12	1.76
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	12	1.76
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	12	1.76
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	12	1.76
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	12	1.76
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	12	1.76
(1,797)	1:A:82:ARG:HA	1:A:65:VAL:HG11	13	1.76
(1,797)	1:A:82:ARG:HA	1:A:65:VAL:HG12	13	1.76
(1,797)	1:A:82:ARG:HA	1:A:65:VAL:HG13	13	1.76
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	1	1.75
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	1	1.75
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	1	1.75
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	1	1.75
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	1	1.75
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	1	1.75
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	15	1.75
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	15	1.75
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	15	1.75
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	15	1.75
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	15	1.75
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	15	1.75
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	9	1.73
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	9	1.73
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	9	1.73
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	9	1.73
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	9	1.73
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	9	1.73
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD21	12	1.72
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD22	12	1.72
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD23	12	1.72
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	12	1.72
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	12	1.72
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	12	1.72
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	12	1.72
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	12	1.72
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	12	1.72
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	24	1.72
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	24	1.72



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	24	1.72
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	24	1.72
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	24	1.72
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	24	1.72
(1,464)	1:A:57:PHE:HA	1:A:64:LEU:HG	29	1.71
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	3	1.71
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	23	1.71
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	21	1.7
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	21	1.7
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	21	1.7
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	21	1.7
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	21	1.7
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	21	1.7
(1,464)	1:A:57:PHE:HA	1:A:64:LEU:HG	10	1.7
(1,1104)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:65:VAL:HG11	13	1.7
(1,1104)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:65:VAL:HG12	13	1.7
(1,1104)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:65:VAL:HG13	13	1.7
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	20	1.69
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	20	1.69
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	20	1.69
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	20	1.69
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	20	1.69
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	20	1.69
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	22	1.69
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	22	1.69
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	22	1.69
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	22	1.69
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	22	1.69
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	22	1.69
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	6	1.68
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	6	1.68
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	6	1.68
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	6	1.68
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	6	1.68
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	6	1.68
(1,464)	1:A:57:PHE:HA	1:A:64:LEU:HG	7	1.68
(1,1578)	1:A:30:GLU:HG3	1:A:27:ASP:HA	19	1.68
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	6	1.67
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	6	1.67
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	6	1.67
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	6	1.67
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	6	1.67



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	6	1.67
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	5	1.67
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	5	1.67
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	5	1.67
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	5	1.67
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	5	1.67
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	5	1.67
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	25	1.67
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	25	1.67
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	25	1.67
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	25	1.67
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	25	1.67
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	25	1.67
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	7	1.66
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	7	1.66
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	7	1.66
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	7	1.66
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	7	1.66
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	7	1.66
(1,464)	1:A:57:PHE:HA	1:A:64:LEU:HG	12	1.66
(1,1578)	1:A:30:GLU:HG3	1:A:27:ASP:HA	22	1.66
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD21	10	1.65
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD22	10	1.65
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD23	10	1.65
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	1	1.65
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	1	1.65
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	1	1.65
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	1	1.65
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	1	1.65
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	1	1.65
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	26	1.65
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	26	1.63
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	26	1.63
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	26	1.63
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	26	1.63
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	26	1.63
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	26	1.63
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	4	1.61
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	4	1.61
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	4	1.61
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	4	1.61
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	4	1.61
( , )	- 0			d on mort mage



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	4	1.61
(1,1104)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:65:VAL:HG11	6	1.61
(1,1104)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:65:VAL:HG12	6	1.61
(1,1104)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:65:VAL:HG13	6	1.61
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	3	1.6
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	3	1.6
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	3	1.6
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	3	1.6
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	3	1.6
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	3	1.6
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	16	1.6
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	16	1.6
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	16	1.6
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	16	1.6
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	16	1.6
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	16	1.6
(1,385)	1:A:78:ALA:HB1	1:A:69:VAL:HG11	1	1.6
(1,385)	1:A:78:ALA:HB1	1:A:69:VAL:HG12	1	1.6
(1,385)	1:A:78:ALA:HB1	1:A:69:VAL:HG13	1	1.6
(1,385)	1:A:78:ALA:HB2	1:A:69:VAL:HG11	1	1.6
(1,385)	1:A:78:ALA:HB2	1:A:69:VAL:HG12	1	1.6
(1,385)	1:A:78:ALA:HB2	1:A:69:VAL:HG13	1	1.6
(1,385)	1:A:78:ALA:HB3	1:A:69:VAL:HG11	1	1.6
(1,385)	1:A:78:ALA:HB3	1:A:69:VAL:HG12	1	1.6
(1,385)	1:A:78:ALA:HB3	1:A:69:VAL:HG13	1	1.6
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD21	29	1.59
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD22	29	1.59
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD23	29	1.59
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	17	1.59
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	17	1.59
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	17	1.59
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	17	1.59
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	17	1.59
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	17	1.59
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	18	1.59
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	18	1.59
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	18	1.59
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	18	1.59
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	18	1.59
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	18	1.59
(1,688)	1:A:82:ARG:HA	1:A:69:VAL:HG21	1	1.58
(1,688)	1:A:82:ARG:HA	1:A:69:VAL:HG22	1	1.58



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,688)	1:A:82:ARG:HA	1:A:69:VAL:HG23	1	1.58
(1,329)	1:A:73:ALA:HB1	1:A:69:VAL:HG11	1	1.58
(1,329)	1:A:73:ALA:HB1	1:A:69:VAL:HG12	1	1.58
(1,329)	1:A:73:ALA:HB1	1:A:69:VAL:HG13	1	1.58
(1,329)	1:A:73:ALA:HB2	1:A:69:VAL:HG11	1	1.58
(1,329)	1:A:73:ALA:HB2	1:A:69:VAL:HG12	1	1.58
(1,329)	1:A:73:ALA:HB2	1:A:69:VAL:HG13	1	1.58
(1,329)	1:A:73:ALA:HB3	1:A:69:VAL:HG11	1	1.58
(1,329)	1:A:73:ALA:HB3	1:A:69:VAL:HG12	1	1.58
(1,329)	1:A:73:ALA:HB3	1:A:69:VAL:HG13	1	1.58
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	7	1.58
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	29	1.57
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	29	1.57
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	29	1.57
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	29	1.57
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	29	1.57
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	29	1.57
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	23	1.56
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	23	1.56
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	23	1.56
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	23	1.56
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	23	1.56
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	23	1.56
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	24	1.56
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	1	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	1	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	1	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	1	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	2	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	2	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	2	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	2	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	3	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	3	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	3	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	3	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	4	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	4	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	4	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	4	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	5	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	5	1.55
( ) - )		<del>-</del>		d on most mage



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	5	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	5	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	6	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	6	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	6	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	6	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	7	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	7	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	7	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	7	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	8	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	8	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	8	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	8	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	9	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	9	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	9	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	9	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	10	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	10	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	10	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	10	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	11	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	11	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	11	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	11	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	12	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	12	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	12	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	12	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	13	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	13	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	13	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	13	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	14	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	14	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	14	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	14	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	15	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	15	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	15	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	15	1.55



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	16	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	16	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	16	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	16	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	17	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	17	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	17	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	17	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	18	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	18	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	18	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	18	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	19	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	19	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	19	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	19	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	20	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	20	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	20	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	20	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	21	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	21	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	21	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	21	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	22	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	22	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	22	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	22	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	23	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	23	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	23	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	23	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	24	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	24	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	24	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	24	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	25	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	25	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	25	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	25	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	26	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	26	1.55



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	26	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	26	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	27	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	27	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	27	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	27	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	28	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	28	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	28	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	28	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	29	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	29	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	29	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	29	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	30	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	30	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	30	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	30	1.55
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	1	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	1	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	1	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	1	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	2	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	2	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	2	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	2	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	3	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	3	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	3	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	3	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	4	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	4	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	4	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	4	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	5	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	5	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	5	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	5	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	6	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	6	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	6	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	6	1.54



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	7	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	7	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	7	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	7	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	8	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	8	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	8	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	8	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	9	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	9	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	9	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	9	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	10	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	10	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	10	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	10	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	11	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	11	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	11	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	11	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	12	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	12	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	12	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	12	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	13	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	13	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	13	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	13	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	14	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	14	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	14	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	14	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	15	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	15	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	15	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	15	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	16	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	16	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	16	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	16	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	17	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	17	1.54



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	17	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	17	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	18	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	18	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	18	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	18	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	19	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	19	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	19	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	19	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	20	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	20	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	20	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	20	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	21	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	21	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	21	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	21	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	22	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	22	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	22	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	22	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	23	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	23	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	23	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	23	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	24	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	24	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	24	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	24	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	25	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	25	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	25	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	25	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	26	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	26	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	26	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	26	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	27	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	27	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	27	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	27	1.54



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

(1,589)         1:A:11:LEU:HB2         1:A:11:LEU:HB3         28         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB3         28         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB2         28         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB2         1:A:11:LEU:HB3         28         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB3         29         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB3         29         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB3         29         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB2         1:A:11:LEU:HB3         29         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB3         30         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB3 </th <th>Key</th> <th>Atom-1</th> <th>Atom-2</th> <th>Model</th> <th>Violation (Å)</th>	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB3         28         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB2         1:A:11:LEU:HB2         28         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB2         1:A:11:LEU:HB3         29         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB3         29         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB3         29         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB2         1:A:11:LEU:HB2         30         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB2         1:A:11:LEU:HB3         30         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB3         30         1.54           (1,278)         1:A:3:1:LYS:HB2         1:A:3:1:LYS:HB2         1         1.54           (1,278)         1:A:3:1:LYS:HB3         1:A:3:1:LYS:HB	(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	28	1.54
(1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB2         1:A:11:LEU:HB2         1:A:11:LEU:HB2         1:A:11:LEU:HB2         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB3         29         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB3         29         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB3         29         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB2         1:A:11:LEU:HB3         29         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB2         1:A:11:LEU:HB3         30         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB3         30         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB3         30         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB3         30         1.54           (1,589)         1:A:11:LY:HB3         1:A:11:LY:HB3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:11:LY:HB3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         2	(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	28	1.54
(1,589)         1:A:11:LEU:HB2         1:A:11:LEU:HB2         1:A:11:LEU:HB3         29         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB3         29         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB2         29         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB2         1:A:11:LEU:HB2         30         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB3         30         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:L	(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	28	1.54
(1,589)         1:A:11:LEU:HB2         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB2         29         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB2         29         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB2         1:A:11:LEU:HB3         29         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB3         30         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LY:HB2         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         2:A:31:LYS:HB3         2:A:31:LYS:HB3         2:A:31:LYS:HB3         2:A:31:LYS:HB3         2:A:31:LYS:HB3         2:A:31:LYS:HB3         2:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3	(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	28	1.54
(1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB3         29         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB2         1:A:11:LEU:HB3         29         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB2         1:A:11:LEU:HB3         30         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB3         30         1.54           (1,589)         1:A:11:LY:HB3         1:A:11:LY:HB3         30         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3	(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	29	1.54
(1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB2         1:54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB2         1:A:11:LEU:HB2         30         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB3         30         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB3         30         1.54           (1,589)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB2         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB2         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB2         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         3	(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	29	1.54
(1,589) 1:A:11:LEU:HB2 1:A:11:LEU:HB2 30 1.54 (1,589) 1:A:11:LEU:HB3 1:A:11:LEU:HB3 30 1.54 (1,278) 1:A:31:LYS:HB2 1:A:31:LYS:HB2 1 1.54 (1,278) 1:A:31:LYS:HB2 1:A:31:LYS:HB2 1 1.54 (1,278) 1:A:31:LYS:HB3 1:A:31:LYS:HB3 2 1.54 (1,278) 1:A:31:LYS:HB2 1:A:31:LYS:HB3 2 1.54 (1,278) 1:A:31:LYS:HB2 1:A:31:LYS:HB3 2 1.54 (1,278) 1:A:31:LYS:HB3 1:A:31:LYS:HB3 3 1.54 (1,278) 1:A:31:LYS:HB3 1:A:31:LYS:HB3 4 1.54 (1,278) 1:A:31:LYS:HB3 1:A:31:LYS:HB3 5 1.54 (1,278) 1:A:31:LYS:HB3 1:A:31:LYS:HB3 6 1.54 (1,278) 1:A:31:LYS:HB3 1:A:31:LYS:HB3 5 1.54 (1,278) 1:A:31:LYS:HB3 1:A:31:LYS:HB3 6 1.54 (1,278) 1:A:31:LYS:HB3 1:A:31:LYS:HB3 7 1.54 (1,278) 1:A:31:LYS:HB3 1:A:31:LYS:HB3 6 1.54 (1,278) 1:A:31:LYS:HB3 1:A:31:LYS:HB3 7 1.54 (1,278) 1:A:31:LYS:HB3 1:A:31:LYS:HB3 6 1.54 (1,278) 1:A:31:LYS:HB3 1:A:31:LYS:HB3 7 1.54 (1,278) 1:A:31:L	(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	29	1.54
(1,589)         1:A:11:LEU:HB2         1:A:11:LEU:HB3         30         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB3         30         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB3         30         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB2         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:3	(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	29	1.54
(1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB3         30         1.54           (1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB3         30         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB2         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31	(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	30	1.54
(1,589)         1:A:11:LEU:HB3         1:A:11:LEU:HB3         30         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB2         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB2         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3	(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	30	1.54
(1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB2         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54	(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	30	1.54
(1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB2         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         <	(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	30	1.54
(1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB2         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         4	(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	1	1.54
(1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB2         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB2         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         5         1.54	(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	1	1.54
(1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB2         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB2         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB2         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB2         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         5         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         <	(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	1	1.54
(1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB2         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         5         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         <	(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	1	1.54
(1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB2         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         5         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         5         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         5         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         <	(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	2	1.54
(1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB2         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB2         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB2         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         5         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         5         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         5         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         6         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         <	(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	2	1.54
(1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB2         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB2         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB2         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB2         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         5         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         5         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         5         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         6         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         <	(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	2	1.54
(1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB2         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB2         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB2         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB2         5         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         5         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         5         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         6         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         6         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         6         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         <	(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	2	1.54
(1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         3         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB2         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB2         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         5         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         5         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         5         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         6         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         6         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         6         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         7         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         7         <	(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	3	1.54
(1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB2         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB2         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB2         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         4         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB2         5         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         5         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         5         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         5         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         6         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         6         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         7         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         7         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         7         <	(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	3	1.54
(1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       4       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       4       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       4       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       4       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       5       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       5       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       5       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3 </td <td>(1,278)</td> <td>1:A:31:LYS:HB3</td> <td>1:A:31:LYS:HB2</td> <td>3</td> <td>1.54</td>	(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	3	1.54
(1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       4       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       4       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       4       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       5       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       5       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       5       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3 </td <td>(1,278)</td> <td>1:A:31:LYS:HB3</td> <td>1:A:31:LYS:HB3</td> <td>3</td> <td>1.54</td>	(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	3	1.54
(1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       4       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       4       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       5       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       5       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       5       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3 </td <td>(1,278)</td> <td>1:A:31:LYS:HB2</td> <td>1:A:31:LYS:HB2</td> <td>4</td> <td>1.54</td>	(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	4	1.54
(1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       4       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       5       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       5       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       5       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       5       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3 </td <td>(1,278)</td> <td>1:A:31:LYS:HB2</td> <td>1:A:31:LYS:HB3</td> <td>4</td> <td>1.54</td>	(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	4	1.54
(1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       5       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       5       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       5       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       5       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3 </td <td>(1,278)</td> <td>1:A:31:LYS:HB3</td> <td>1:A:31:LYS:HB2</td> <td>4</td> <td>1.54</td>	(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	4	1.54
(1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       5       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       5       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       5       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3 </td <td>(1,278)</td> <td>1:A:31:LYS:HB3</td> <td>1:A:31:LYS:HB3</td> <td>4</td> <td>1.54</td>	(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	4	1.54
(1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       5       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       5       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       5       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       8       1.54	(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	5	1.54
(1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       5       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       8       1.54	(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	5	1.54
(1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       8       1.54	(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	5	1.54
(1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       8       1.54	(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	5	1.54
(1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       8       1.54	(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	6	1.54
(1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       6       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       8       1.54	_ ` ' /	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	6	1.54
(1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       8       1.54	/	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	6	1.54
(1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       8       1.54	(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	6	1.54
(1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       8       1.54	(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	7	1.54
(1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB2       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB3       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       8       1.54	(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	7	1.54
(1,278)       1:A:31:LYS:HB3       7       1.54         (1,278)       1:A:31:LYS:HB2       1:A:31:LYS:HB2       8       1.54	_ ` /	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	7	1.54
(1,278) 1:A:31:LYS:HB2 1:A:31:LYS:HB2 8 1.54	_ `	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	7	1.54
	(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	8	1.54
$\left[\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	8	1.54



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	8	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	8	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	9	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	9	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	9	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	9	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	10	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	10	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	10	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	10	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	11	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	11	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	11	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	11	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	12	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	12	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	12	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	12	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	13	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	13	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	13	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	13	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	14	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	14	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	14	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	14	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	15	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	15	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	15	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	15	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	16	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	16	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	16	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	16	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	17	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	17	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	17	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	17	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	18	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	18	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	18	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	18	1.54



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	19	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	19	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	19	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	19	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	20	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	20	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	20	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	20	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	21	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	21	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	21	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	21	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	22	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	22	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	22	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	22	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	23	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	23	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	23	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	23	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	24	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	24	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	24	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	24	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	25	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	25	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	25	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	25	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	26	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	26	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	26	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	26	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	27	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	27	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	27	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	27	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	28	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	28	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	28	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	28	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	29	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	29	1.54



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

(1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         29         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         29         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         30         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         30         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         30         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         30         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         1         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         1         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         1         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         2         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         2         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         2         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,278)         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB2         1:A:31:LYS:HB3         30         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         30         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         30         1.54           (1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:31:LYS:HB3         30         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:21:LEU:HB2         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         1           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         1           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         1           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         2           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         2           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         2           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         2           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         3           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         3           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         3	(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	29	1.54
(1,278) 1:A:31:LYS:HB2 1:A:31:LYS:HB3 30 1.54 (1,278) 1:A:31:LYS:HB3 1:A:31:LYS:HB3 30 1.54 (1,278) 1:A:31:LYS:HB3 1:A:31:LYS:HB3 30 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB2 1 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 1 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 1 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 1 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 2 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 2 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 2 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 3 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 3 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 4 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 5 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 6 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 7 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 6 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 7 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 7 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU	(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	29	1.54
(1,278) 1:A:31:LYS:HB3 1:A:31:LYS:HB2 30 1.54 (1,278) 1:A:31:LYS:HB3 1:A:31:LYS:HB3 30 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB2 1 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 1 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 1 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 2 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 2 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 3 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 4 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 5 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 6 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 5 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 6 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 7 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 6 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 7 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:	(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	30	1.54
(1,278)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:22:LEU:HB2         1         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         1         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         1         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         1         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         1         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         2         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         2         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         2         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         2         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         <	(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	30	1.54
(1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB2 1 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 1 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB2 1 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB2 1 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 1 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 2 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 2 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 3 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 3 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 4 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 5 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 6 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 6 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 5 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 6 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 7 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 6 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 7 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB	(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	30	1.54
(1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 1 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB2 1 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 1 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB2 2 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB2 2 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 3 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 3 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 3 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 4 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 5 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 6 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 6 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 6 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 7 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 8 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 9 1.54	(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	30	1.54
(1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB2 1 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 1 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB2 2 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 2 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 3 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 3 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 4 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB2 4 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 5 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 6 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 7 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 8 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 8 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 8 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 9 1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	1	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         1         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         2         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         2         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         2         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         2         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         <	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	1	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         2         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         2         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         2         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         2         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         5         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         <	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	1	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         2         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         2         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         2         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         5         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         5         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         <	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	1	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         2         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         2         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         5         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         5         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         5         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         <	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	2	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         2         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         5         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         <	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	2	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         5         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         5         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         5         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         6         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         6         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         <	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	2	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         5         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         5         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         5         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         6         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         6         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         6         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         <	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	2	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         5         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         5         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         5         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         6         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         6         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         6         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         <	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	3	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         5         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         5         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         5         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         5         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         6         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         6         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         6         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         7         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         <	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	3	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         5         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         5         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         5         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         5         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         6         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         6         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         6         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         7         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         7         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         <	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	3	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         4         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         5         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         5         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         5         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         5         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         6         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         6         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         6         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         7         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         7         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         7         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         <	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	3	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       4       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       4       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       5       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       5       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       5       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       5       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3 </td <td>(1,110)</td> <td>1:A:22:LEU:HB2</td> <td>1:A:22:LEU:HB2</td> <td>4</td> <td>1.54</td>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	4	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       5       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       5       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       5       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       5       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       1:A:4         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	4	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       5       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       5       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       5       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       5       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3 </td <td>(1,110)</td> <td>1:A:22:LEU:HB3</td> <td>1:A:22:LEU:HB2</td> <td>4</td> <td>1.54</td>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	4	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       5       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       5       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       5       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3 </td <td>(1,110)</td> <td>1:A:22:LEU:HB3</td> <td>1:A:22:LEU:HB3</td> <td>4</td> <td>1.54</td>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	4	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       5       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       5       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       9       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3 </td <td>(1,110)</td> <td>1:A:22:LEU:HB2</td> <td>1:A:22:LEU:HB2</td> <td>5</td> <td>1.54</td>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	5	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       5       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       9       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       9       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3 </td <td>(1,110)</td> <td>1:A:22:LEU:HB2</td> <td>1:A:22:LEU:HB3</td> <td>5</td> <td>1.54</td>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	5	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       1:A:4         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       9       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       9       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       9       1.54 <td>(1,110)</td> <td>1:A:22:LEU:HB3</td> <td>1:A:22:LEU:HB2</td> <td>5</td> <td>1.54</td>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	5	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       9       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       9       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       9       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	5	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       9       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       9       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       9       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	6	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       6       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       9       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       9       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       9       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       9       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	6	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       9       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       9       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       9       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	6	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       9       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       9       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       9       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	6	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       9       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       9       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	7	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       7       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       9       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       9       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       9       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	7	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       9       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       9       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	7	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       9       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       9       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       9       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	7	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       9       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       9       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       9       1.54		1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	8	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       9       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       9       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	8	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       8       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       9       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       9       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	8	1.54
(1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 9 1.54		1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	8	1.54
( ) /		1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	9	1.54
(1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB2 9 1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	9	1.54
	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	9	1.54
(1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 9 1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	9	1.54



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

(1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         10         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         10         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         10         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         10         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         11         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         11         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         11         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         11         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         12         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         12         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         12         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         13         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         13         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3 </th <th>Key</th> <th>Atom-1</th> <th>Atom-2</th> <th>Model</th> <th>Violation (Å)</th>	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB2 10 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 10 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 11 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 11 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 12 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 13 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 14 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 15 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 16 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 17 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 19 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 19 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 19 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	10	1.54
(1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 10 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB2 11 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 11 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 11 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 12 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 12 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 13 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 13 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 14 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 14 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 15 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 16 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 17 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 19 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 19 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	10	1.54
(1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB2 11 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 12 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 12 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 13 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 14 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 15 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 16 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 15 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 16 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 17 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 19 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	10	1.54
(1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 11 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB2 11 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 11 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 11 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 12 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 12 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 13 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 13 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 14 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 15 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 16 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 16 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 16 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 17 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 16 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 17 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 19 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	10	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         11         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         11         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         12         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         12         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         12         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         12         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         12         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         13         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         13         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         13         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3 </td <td>(1,110)</td> <td>1:A:22:LEU:HB2</td> <td>1:A:22:LEU:HB2</td> <td>11</td> <td>1.54</td>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	11	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         1:A:4           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         12         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         12         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         12         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         12         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         13         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         13         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         13         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         13         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         15<	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	11	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         12         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         12         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         12         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         12         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         12         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         13         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         13         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         13         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3 </td <td>(1,110)</td> <td>1:A:22:LEU:HB3</td> <td>1:A:22:LEU:HB2</td> <td>11</td> <td>1.54</td>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	11	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         12         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         12         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         12         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         12         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110) <t< td=""><td>(1,110)</td><td>1:A:22:LEU:HB3</td><td>1:A:22:LEU:HB3</td><td>11</td><td>1.54</td></t<>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	11	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         12         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         12         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         13         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         13         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         13         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         13         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3 </td <td>(1,110)</td> <td>1:A:22:LEU:HB2</td> <td>1:A:22:LEU:HB2</td> <td>12</td> <td>1.54</td>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	12	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         12         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         13         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         13         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         13         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54 </td <td>(1,110)</td> <td>1:A:22:LEU:HB2</td> <td>1:A:22:LEU:HB3</td> <td>12</td> <td>1.54</td>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	12	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         13         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         13         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         13         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         15         1.54         (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	12	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         13         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         13         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3 </td <td>(1,110)</td> <td>1:A:22:LEU:HB3</td> <td>1:A:22:LEU:HB3</td> <td>12</td> <td>1.54</td>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	12	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         13         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         13         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54           (1,110)         1:A:	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	13	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         13         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         17         1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	13	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         17         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         17         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3 </td <td>(1,110)</td> <td>1:A:22:LEU:HB3</td> <td>1:A:22:LEU:HB2</td> <td>13</td> <td>1.54</td>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	13	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         17         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         17         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         17         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3 </td <td>(1,110)</td> <td>1:A:22:LEU:HB3</td> <td>1:A:22:LEU:HB3</td> <td>13</td> <td>1.54</td>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	13	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         16         1.54         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         16         1.54         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         17         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         17         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         17         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         17         1.54 <t< td=""><td>(1,110)</td><td>1:A:22:LEU:HB2</td><td>1:A:22:LEU:HB2</td><td>14</td><td>1.54</td></t<>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	14	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         14         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         16         1.54         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         17         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         17         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         17         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         17         1.54           (1,110)         1:A:	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	14	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         17         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         17         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         17         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         18         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         18         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3 </td <td>(1,110)</td> <td>1:A:22:LEU:HB3</td> <td>1:A:22:LEU:HB2</td> <td>14</td> <td>1.54</td>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	14	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         17         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         17         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         17         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         17         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         18         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         18         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3 </td <td>(1,110)</td> <td>1:A:22:LEU:HB3</td> <td>1:A:22:LEU:HB3</td> <td>14</td> <td>1.54</td>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	14	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         17         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         17         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         18         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         18         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         18         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         19	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	15	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         15         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         16         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         17         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         17         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         17         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         17         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         18         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         18         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         18         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         19         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3 </td <td>(1,110)</td> <td>1:A:22:LEU:HB2</td> <td>1:A:22:LEU:HB3</td> <td>15</td> <td>1.54</td>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	15	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       16       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       16       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       16       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       16       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       17       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       17       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       17       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       17       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       17       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	15	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       16       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       16       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       16       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       17       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       17       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       17       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       17       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	15	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       16       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       16       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       17       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       17       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       17       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       17       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       17       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	16	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       16       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       17       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       17       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       17       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       17       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	16	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       17       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       17       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       17       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       17       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       20       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	16	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       17       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       17       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       17       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       20       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	16	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       17       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       17       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       20       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	17	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       17       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       20       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	17	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       20       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	17	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       20       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	17	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       20       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	18	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       18       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       20       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	18	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       20       1.54		1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	18	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       20       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	18	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       20       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	19	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       19       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       20       1.54		1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	19	1.54
(1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB2 20 1.54		1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	19	1.54
	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	19	1.54
(4.440)	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	20	1.54
(1,110)   1:A:22:LEU:HB2   1:A:22:LEU:HB3   20   1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	20	1.54



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

(1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB2 20 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 20 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 21 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 21 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 22 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 23 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 24 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 25 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 26 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 29 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 29 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 29 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         21         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         21         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         21         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         21         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         22         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         23         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         23         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         23         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3 </td <td>(1,110)</td> <td>1:A:22:LEU:HB3</td> <td>1:A:22:LEU:HB2</td> <td>20</td> <td>1.54</td>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	20	1.54
(1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 21 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 21 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 21 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 22 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 22 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 23 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 24 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 25 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 26 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 27 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 26 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 27 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 29 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	20	1.54
(1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB2 21 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 21 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB2 22 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 23 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 23 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 24 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 25 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 26 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 27 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 29 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	21	1.54
(1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 22 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB2 22 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 23 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 23 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 24 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 25 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 26 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 27 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 27 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 27 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 29 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	21	1.54
(1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB2 22 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 22 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB2 22 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB2 22 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB2 23 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 23 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 24 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 24 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 25 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 26 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 27 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 29 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	21	1.54
(1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 22 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 22 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 22 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB2 23 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB2 23 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB2 23 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 23 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 24 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 24 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 25 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 25 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 25 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 26 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 27 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 29 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	21	1.54
(1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB2 22 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 22 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB2 23 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 23 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 23 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB2 23 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 23 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 23 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 24 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 24 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 25 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 26 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 27 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 27 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 29 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	22	1.54
(1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 23 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB2 23 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 23 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 23 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 23 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 23 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 23 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 24 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB2 1:A:22:LEU:HB3 24 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 25 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 26 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 27 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 29 1.54 (1,110) 1:A:22:LEU:HB3	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	22	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         23         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         23         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         23         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         23         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3 </td <td>(1,110)</td> <td>1:A:22:LEU:HB3</td> <td>1:A:22:LEU:HB2</td> <td>22</td> <td>1.54</td>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	22	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         23         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         23         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         23         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3 </td <td>(1,110)</td> <td>1:A:22:LEU:HB3</td> <td>1:A:22:LEU:HB3</td> <td>22</td> <td>1.54</td>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	22	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         23         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         23         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3 </td <td>(1,110)</td> <td>1:A:22:LEU:HB2</td> <td>1:A:22:LEU:HB2</td> <td>23</td> <td>1.54</td>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	23	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         23         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         27         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3 </td <td>(1,110)</td> <td>1:A:22:LEU:HB2</td> <td>1:A:22:LEU:HB3</td> <td>23</td> <td>1.54</td>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	23	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         27         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3 </td <td>(1,110)</td> <td>1:A:22:LEU:HB3</td> <td>1:A:22:LEU:HB2</td> <td>23</td> <td>1.54</td>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	23	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         27         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         27         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3 </td <td>(1,110)</td> <td>1:A:22:LEU:HB3</td> <td>1:A:22:LEU:HB3</td> <td>23</td> <td>1.54</td>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	23	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         27         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         27         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         27         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3 </td <td>(1,110)</td> <td>1:A:22:LEU:HB2</td> <td>1:A:22:LEU:HB2</td> <td>24</td> <td>1.54</td>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	24	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         24         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         27         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         27         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         27         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3 </td <td>(1,110)</td> <td>1:A:22:LEU:HB2</td> <td>1:A:22:LEU:HB3</td> <td>24</td> <td>1.54</td>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	24	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         27         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         27         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         27         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         28         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3 </td <td>(1,110)</td> <td>1:A:22:LEU:HB3</td> <td>1:A:22:LEU:HB2</td> <td>24</td> <td>1.54</td>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	24	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         27         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         27         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         27         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         28         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         28         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3 </td <td>(1,110)</td> <td>1:A:22:LEU:HB3</td> <td>1:A:22:LEU:HB3</td> <td>24</td> <td>1.54</td>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	24	1.54
(1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         25         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB2         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB2         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         26         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         27         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         27         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         27         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         27         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3         28         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB3         1:A:22:LEU:HB3         28         1.54           (1,110)         1:A:22:LEU:HB2         1:A:22:LEU:HB3 </td <td>(1,110)</td> <td>1:A:22:LEU:HB2</td> <td>1:A:22:LEU:HB2</td> <td>25</td> <td>1.54</td>	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	25	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       25       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       26       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       26       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       26       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       26       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	25	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       26       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       26       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       26       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       26       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	25	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       26       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       26       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       26       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	25	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       26       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       26       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	26	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       26       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	26	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	26	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	26	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       30       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	27	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       27       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       30       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	27	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       30       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	27	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       30       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	27	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       30       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	28	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       28       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       30       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	28	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       30       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	28	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       30       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	28	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       30       1.54	, ,	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	29	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB3       29       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       30       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	29	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB2       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       30       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	29	1.54
(1,110)       1:A:22:LEU:HB2       1:A:22:LEU:HB3       30       1.54         (1,110)       1:A:22:LEU:HB3       1:A:22:LEU:HB2       30       1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	29	1.54
(1,110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB2 30 1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	30	1.54
	(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	30	1.54
(1.110) 1:A:22:LEU:HB3 1:A:22:LEU:HB3 30 1.54	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	30	1.54
1 \ , , ,   30   1.01	(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	30	1.54



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	27	1.52
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	27	1.52
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	27	1.52
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	27	1.52
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	27	1.52
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	27	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	1	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	1	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	1	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	1	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	2	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	2	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	2	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	2	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	3	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	3	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	3	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	3	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	4	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	4	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	4	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	4	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	5	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	5	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	5	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	5	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	6	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	6	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	6	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	6	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	7	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	7	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	7	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	7	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	8	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	8	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	8	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	8	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	9	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	9	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	9	1.52
(1,292)				



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	10	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	10	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	10	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	10	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	11	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	11	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	11	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	11	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	12	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	12	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	12	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	12	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	13	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	13	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	13	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	13	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	14	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	14	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	14	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	14	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	15	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	15	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	15	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	15	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	16	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	16	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	16	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	16	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	17	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	17	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	17	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	17	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	18	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	18	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	18	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	18	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	19	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	19	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	19	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	19	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	20	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	20	1.52



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	20	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	20	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	21	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	21	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	21	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	21	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	22	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	22	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	22	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	22	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	23	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	23	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	23	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	23	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	24	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	24	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	24	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	24	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	25	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	25	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	25	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	25	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	26	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	26	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	26	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	26	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	27	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	27	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	27	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	27	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	28	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	28	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	28	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	28	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	29	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	29	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	29	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	29	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	30	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	30	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	30	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	30	1.52



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	1	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	1	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	1	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	1	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	2	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	2	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	2	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	2	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	3	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	3	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	3	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	3	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	4	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	4	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	4	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	4	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	5	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	5	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	5	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	5	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	6	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	6	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	6	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	6	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	7	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	7	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	7	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	7	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	8	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	8	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	8	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	8	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	9	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	9	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	9	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	9	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	10	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	10	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	10	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	10	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	11	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	11	1.52



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	11	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	11	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	12	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	12	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	12	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	12	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	13	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	13	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	13	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	13	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	14	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	14	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	14	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	14	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	15	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	15	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	15	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	15	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	16	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	16	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	16	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	16	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	17	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	17	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	17	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	17	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	18	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	18	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	18	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	18	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	19	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	19	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	19	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	19	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	20	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	20	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	20	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	20	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	21	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	21	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	21	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	21	1.52



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

(1,281) 1:A:55:GLN:HB2 1:A:55:GLN:HB3 22 1.52 (1,281) 1:A:55:GLN:HB3 1:A:55:GLN:HB3 22 1.52 (1,281) 1:A:55:GLN:HB3 1:A:55:GLN:HB3 22 1.52 (1,281) 1:A:55:GLN:HB3 1:A:55:GLN:HB3 22 1.52 (1,281) 1:A:55:GLN:HB2 1:A:55:GLN:HB3 22 1.52 (1,281) 1:A:55:GLN:HB2 1:A:55:GLN:HB3 23 1.52 (1,281) 1:A:55:GLN:HB2 1:A:55:GLN:HB3 23 1.52 (1,281) 1:A:55:GLN:HB3 1:A:55:GLN:HB3 24 1.52 (1,281) 1:A:55:GLN:HB2 1:A:55:GLN:HB3 24 1.52 (1,281) 1:A:55:GLN:HB3 1:A:55:GLN:HB3 25 1.52 (1,281) 1:A:55:GLN:HB3 1:A:55:GLN:HB3 26 1.52 (1,281) 1:A:55:GLN:HB3 1:A:55:GLN:HB3 27 1.52 (1,281) 1:A:55:GLN:HB3 1:A:55:GLN:HB3 27 1.52 (1,281) 1:A:55:GLN:HB3 1:A:55:GLN:HB3 29 1.52 (1,281) 1:A:55:GLN:HB3	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         22         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         22         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB2         23         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         23         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         23         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         26 </td <td>(1,281)</td> <td>1:A:55:GLN:HB2</td> <td>1:A:55:GLN:HB2</td> <td>22</td> <td>1.52</td>	(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	22	1.52
(1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         2         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB2         23         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         23         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         23         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         23         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3 <td>(1,281)</td> <td>1:A:55:GLN:HB2</td> <td>1:A:55:GLN:HB3</td> <td>22</td> <td>1.52</td>	(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	22	1.52
(1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         23         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         23         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         23         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB2         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3 </td <td>(1,281)</td> <td>1:A:55:GLN:HB3</td> <td>1:A:55:GLN:HB2</td> <td>22</td> <td>1.52</td>	(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	22	1.52
(1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         23         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         23         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         23         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3 </td <td>(1,281)</td> <td>1:A:55:GLN:HB3</td> <td>1:A:55:GLN:HB3</td> <td>22</td> <td>1.52</td>	(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	22	1.52
(1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         23         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         23         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB2         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3 </td <td>(1,281)</td> <td>1:A:55:GLN:HB2</td> <td>1:A:55:GLN:HB2</td> <td>23</td> <td>1.52</td>	(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	23	1.52
(1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB2         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3 </td <td>(1,281)</td> <td>1:A:55:GLN:HB2</td> <td>1:A:55:GLN:HB3</td> <td>23</td> <td>1.52</td>	(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	23	1.52
(1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3 </td <td>(1,281)</td> <td>1:A:55:GLN:HB3</td> <td>1:A:55:GLN:HB2</td> <td>23</td> <td>1.52</td>	(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	23	1.52
(1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB2         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3 </td <td>(1,281)</td> <td>1:A:55:GLN:HB3</td> <td>1:A:55:GLN:HB3</td> <td>23</td> <td>1.52</td>	(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	23	1.52
(1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB2         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3 </td <td>(1,281)</td> <td>1:A:55:GLN:HB2</td> <td>1:A:55:GLN:HB2</td> <td>24</td> <td>1.52</td>	(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	24	1.52
(1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         24         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB2         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB2         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3 </td <td>(1,281)</td> <td>1:A:55:GLN:HB2</td> <td>1:A:55:GLN:HB3</td> <td>24</td> <td>1.52</td>	(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	24	1.52
(1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB2         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3 </td <td>(1,281)</td> <td>1:A:55:GLN:HB3</td> <td>1:A:55:GLN:HB2</td> <td>24</td> <td>1.52</td>	(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	24	1.52
(1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB2         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3 </td <td>(1,281)</td> <td>1:A:55:GLN:HB3</td> <td>1:A:55:GLN:HB3</td> <td>24</td> <td>1.52</td>	(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	24	1.52
(1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB2         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3 </td <td>(1,281)</td> <td>1:A:55:GLN:HB2</td> <td>1:A:55:GLN:HB2</td> <td>25</td> <td>1.52</td>	(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	25	1.52
(1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         25         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB2         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB2         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3 </td <td>(1,281)</td> <td>1:A:55:GLN:HB2</td> <td>1:A:55:GLN:HB3</td> <td>25</td> <td>1.52</td>	(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	25	1.52
(1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB2         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3 </td <td>(1,281)</td> <td>1:A:55:GLN:HB3</td> <td>1:A:55:GLN:HB2</td> <td>25</td> <td>1.52</td>	(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	25	1.52
(1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB2         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         29	(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	25	1.52
(1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB2         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3 </td <td>(1,281)</td> <td>1:A:55:GLN:HB2</td> <td>1:A:55:GLN:HB2</td> <td>26</td> <td>1.52</td>	(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	26	1.52
(1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         26         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB2         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3 </td <td>(1,281)</td> <td>1:A:55:GLN:HB2</td> <td>1:A:55:GLN:HB3</td> <td>26</td> <td>1.52</td>	(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	26	1.52
(1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB2         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB2         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB2         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         30         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3 </td <td>(1,281)</td> <td>1:A:55:GLN:HB3</td> <td>1:A:55:GLN:HB2</td> <td>26</td> <td>1.52</td>	(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	26	1.52
(1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB2         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         30         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3 </td <td>(1,281)</td> <td>1:A:55:GLN:HB3</td> <td>1:A:55:GLN:HB3</td> <td>26</td> <td>1.52</td>	(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	26	1.52
(1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         27         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB2         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         30         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         30         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3 </td <td>(1,281)</td> <td>1:A:55:GLN:HB2</td> <td>1:A:55:GLN:HB2</td> <td>27</td> <td>1.52</td>	(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	27	1.52
(1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB3       27       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB2       1:A:55:GLN:HB2       28       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB2       1:A:55:GLN:HB3       28       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB2       28       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB3       28       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB3       29       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB2       1:A:55:GLN:HB3       29       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB3       29       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB3       29       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB3       29       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB2       1:A:55:GLN:HB3       30       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB3       30       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB3       30       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:15       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB3	(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	27	1.52
(1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB2         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         30         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         30         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         30         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         1.52           (1,591)         1:A:112:ASN:HB3         1:A:112:ASN:HB3         1<	(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	27	1.52
(1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB2         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB2         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         30         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         30         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:15         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         1.52           (1,591)         1:A:112:ASN:HB3         1:A:112:ASN:HB3         1         1.51           (1,591)         1:A:112:ASN:HB3         1:A:112:ASN:HB3         1         1.51	(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	27	1.52
(1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         28         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB2         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         29         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         30         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB2         1:A:55:GLN:HB3         30         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         30         1.52           (1,281)         1:A:55:GLN:HB3         1:A:55:GLN:HB3         1.52           (1,281)         1:A:112:ASN:HB3         1:A:112:ASN:HB2         1         1.51           (1,591)         1:A:112:ASN:HB2         1:A:112:ASN:HB3         1         1.51           (1,591)         1:A:112:ASN:HB3         1:A:112:ASN:HB3         1         1.51           (1,591)         1:A:112:ASN:HB3         1:A:112:ASN:HB3 <td< td=""><td>(1,281)</td><td>1:A:55:GLN:HB2</td><td>1:A:55:GLN:HB2</td><td>28</td><td>1.52</td></td<>	(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	28	1.52
(1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB3       28       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB2       1:A:55:GLN:HB2       29       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB2       1:A:55:GLN:HB3       29       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB2       29       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB3       29       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB2       1:A:55:GLN:HB3       30       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB2       1:A:55:GLN:HB3       30       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB3       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB2       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51	(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	28	1.52
(1,281)       1:A:55:GLN:HB2       1:A:55:GLN:HB2       29       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB2       1:A:55:GLN:HB3       29       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB2       29       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB3       29       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB2       1:A:55:GLN:HB2       30       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB2       1:A:55:GLN:HB3       30       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB2       30       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB3       30       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:112:ASN:HB3       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB2       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51	(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	28	1.52
(1,281)       1:A:55:GLN:HB2       1:A:55:GLN:HB3       29       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB2       29       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB3       29       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB2       1:A:55:GLN:HB2       30       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB2       1:A:55:GLN:HB3       30       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB2       30       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB3       30       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:15       1.52         (1,591)       1:A:112:ASN:HB2       1:A:112:ASN:HB2       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51	(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	28	1.52
(1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB2       29       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB3       29       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB2       1:A:55:GLN:HB2       30       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB2       1:A:55:GLN:HB3       30       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB2       30       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB3       30       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB2       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51	(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	29	1.52
(1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB3       29       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB2       1:A:55:GLN:HB2       30       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB2       1:A:55:GLN:HB3       30       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB2       30       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB3       30       1.52         (1,591)       1:A:112:ASN:HB2       1:A:112:ASN:HB2       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51	(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	29	1.52
(1,281)       1:A:55:GLN:HB2       1:A:55:GLN:HB2       30       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB2       1:A:55:GLN:HB3       30       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB2       30       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB3       30       1.52         (1,281)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB2       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB2       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51	(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	29	1.52
(1,281)       1:A:55:GLN:HB2       1:A:55:GLN:HB3       30       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB2       30       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB3       30       1.52         (1,591)       1:A:112:ASN:HB2       1:A:112:ASN:HB2       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51	(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	29	1.52
(1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB2       30       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB3       30       1.52         (1,591)       1:A:112:ASN:HB2       1:A:112:ASN:HB2       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB2       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB2       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51	(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	30	1.52
(1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB2       30       1.52         (1,281)       1:A:55:GLN:HB3       1:A:55:GLN:HB3       30       1.52         (1,591)       1:A:112:ASN:HB2       1:A:112:ASN:HB2       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB2       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB2       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51	(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	30	1.52
(1,591)       1:A:112:ASN:HB2       1:A:112:ASN:HB2       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB2       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB2       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51	(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	30	1.52
(1,591)       1:A:112:ASN:HB2       1:A:112:ASN:HB2       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB2       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB2       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51	(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	30	1.52
(1,591)       1:A:112:ASN:HB2       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB2       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51	/	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	1	1.51
(1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB2       1       1.51         (1,591)       1:A:112:ASN:HB3       1:A:112:ASN:HB3       1       1.51	(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	1	1.51
(1,591) 1:A:112:ASN:HB3 1:A:112:ASN:HB3 1 1.51	/	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	1	1.51
(1 501) 1.A.119.ACN.HP9 1.A.119.ACN.HP9 9 1.51	(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	1	1.51
(1.001)   1.A.112.A6N.11D2   1.A.112.A6N.11D2   2   1.01	(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	2	1.51
(1,591) 1:A:112:ASN:HB2 1:A:112:ASN:HB3 2 1.51	(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	2	1.51



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	2	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	2	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	3	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	3	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	3	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	3	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	4	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	4	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	4	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	4	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	5	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	5	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	5	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	5	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	6	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	6	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	6	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	6	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	7	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	7	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	7	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	7	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	8	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	8	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	8	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	8	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	9	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	9	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	9	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	9	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	10	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	10	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	10	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	10	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	11	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	11	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	11	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	11	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	12	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	12	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	12	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	12	1.51



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	13	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	13	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	13	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	13	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	14	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	14	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	14	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	14	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	15	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	15	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	15	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	15	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	16	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	16	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	16	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	16	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	17	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	17	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	17	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	17	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	18	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	18	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	18	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	18	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	19	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	19	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	19	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	19	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	20	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	20	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	20	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	20	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	21	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	21	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	21	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	21	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	22	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	22	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	22	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	22	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	23	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	23	1.51



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	23	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	23	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	24	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	24	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	24	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	24	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	25	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	25	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	25	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	25	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	26	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	26	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	26	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	26	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	27	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	27	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	27	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	27	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	28	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	28	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	28	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	28	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	29	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	29	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	29	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	29	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	30	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	30	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	30	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	30	1.51
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	19	1.51
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	19	1.51
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	19	1.51
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	19	1.51
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	19	1.51
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	19	1.51
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	2	1.5
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	2	1.5
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	2	1.5
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	2	1.5
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	2	1.5
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	2	1.5



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1511)	1:A:65:VAL:HG21	1:A:85:VAL:HG11	10	1.49
(1,1511)	1:A:65:VAL:HG21	1:A:85:VAL:HG12	10	1.49
(1,1511)	1:A:65:VAL:HG21	1:A:85:VAL:HG13	10	1.49
(1,1511)	1:A:65:VAL:HG22	1:A:85:VAL:HG11	10	1.49
(1,1511)	1:A:65:VAL:HG22	1:A:85:VAL:HG12	10	1.49
(1,1511)	1:A:65:VAL:HG22	1:A:85:VAL:HG13	10	1.49
(1,1511)	1:A:65:VAL:HG23	1:A:85:VAL:HG11	10	1.49
(1,1511)	1:A:65:VAL:HG23	1:A:85:VAL:HG12	10	1.49
(1,1511)	1:A:65:VAL:HG23	1:A:85:VAL:HG13	10	1.49
(1,1511)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:85:VAL:HG11	10	1.49
(1,1511)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:85:VAL:HG12	10	1.49
(1,1511)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:85:VAL:HG13	10	1.49
(1,1511)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:85:VAL:HG11	10	1.49
(1,1511)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:85:VAL:HG12	10	1.49
(1,1511)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:85:VAL:HG13	10	1.49
(1,1511)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:85:VAL:HG11	10	1.49
(1,1511)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:85:VAL:HG12	10	1.49
(1,1511)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:85:VAL:HG13	10	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	1	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	1	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	1	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	1	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	2	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	2	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	2	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	2	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	3	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	3	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	3	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	3	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	4	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	4	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	4	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	4	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	5	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	5	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	5	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	5	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	6	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	6	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	6	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	6	1.49



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

(1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB2         7         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         7         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         7         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         7         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB2         8         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         8         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         8         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         8         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         8         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         7         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         7         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB2         8         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         8         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         8         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         8         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB2         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:H	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	7	1.49
(1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB2         8         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         8         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         8         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         8         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         8         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	7	1.49
(1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         8         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         8         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         8         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         8         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	7	1.49
(1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         8         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         8         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         8         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB2         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:AS	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	7	1.49
(1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         8         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB2         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	8	1.49
(1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB2         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB2         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	8	1.49
(1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	8	1.49
(1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB2         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	8	1.49
(1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB2         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	9	1.49
(1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         9         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB2         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         13	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	9	1.49
(1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB2         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB2         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         13         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	9	1.49
(1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         13         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         13         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	9	1.49
(1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB2         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         13         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         13         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         13         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         14         1.49           (1,1193)         1:	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	10	1.49
(1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB2         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB2         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         13         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         13         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         13         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         14         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	10	1.49
(1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         10         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB2         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB2         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         13         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         13         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         13         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         14         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	10	1.49
(1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB2         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         13         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         13         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         13         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         14         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         14         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         14         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:		1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	10	1.49
(1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB2         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB2         13         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         13         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         13         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         14         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	11	1.49
(1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         11         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB2         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB2         13         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         13         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         13         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         14         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         14         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	11	1.49
(1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB2         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB2         13         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         13         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         13         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         13         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         14         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         14         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         14         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         14         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         14         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	11	1.49
(1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         12         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB2         13         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         13         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB2         13         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         13         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         14         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         14         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB3         1:A:90:ASP:HB3         14         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         14         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         15         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:A:90:ASP:HB3         15         1.49           (1,1193)         1:A:90:ASP:HB2         1:	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	11	1.49
(1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB2       12       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB3       12       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB2       13       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB3       13       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB3       13       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB3       13       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB2       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB3       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB3       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB2       15       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB3       15       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB3       15       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB3       15       1.49	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	12	1.49
(1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB3       12       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB2       13       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB3       13       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB2       13       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB3       13       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB2       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB3       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB3       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB2       15       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB3       15       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB3       15       1.49	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	12	1.49
(1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB2       13       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB3       13       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB2       13       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB3       13       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB2       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB3       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB3       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB2       15       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB3       15       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB3       15       1.49	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	12	1.49
(1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB3       13       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB2       13       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB3       13       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB2       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB3       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB3       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB2       15       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB3       15       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB3       15       1.49	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	12	1.49
(1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB2       13       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB3       13       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB2       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB3       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB2       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB3       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB2       15       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB3       15       1.49	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	13	1.49
(1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB3       13       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB2       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB3       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB2       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB3       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB2       15       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB3       15       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB3       15       1.49	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	13	1.49
(1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB2       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB3       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB2       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB3       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB2       15       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB3       15       1.49	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	13	1.49
(1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB3       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB2       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB3       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB2       15       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB3       15       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB3       15       1.49	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	13	1.49
(1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB2       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB3       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB2       15       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB3       15       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB3       15       1.49	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	14	1.49
(1,1193)       1:A:90:ASP:HB3       1:A:90:ASP:HB3       14       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB2       15       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB3       15       1.49	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	14	1.49
(1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB2       15       1.49         (1,1193)       1:A:90:ASP:HB2       1:A:90:ASP:HB3       15       1.49	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	14	1.49
(1,1193) 1:A:90:ASP:HB2 1:A:90:ASP:HB3 15 1.49	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	14	1.49
	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	15	1.49
(1,1193) 1:A:90:ASP:HB3 1:A:90:ASP:HB2 15 1.49	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	15	1.49
	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	15	1.49
(1,1193) 1:A:90:ASP:HB3 1:A:90:ASP:HB3 15 1.49	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	15	1.49
(1,1193) 1:A:90:ASP:HB2 1:A:90:ASP:HB2 16 1.49	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	16	1.49
(1,1193) 1:A:90:ASP:HB2 1:A:90:ASP:HB3 16 1.49		1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	16	1.49
(1,1193) 1:A:90:ASP:HB3 1:A:90:ASP:HB2 16 1.49	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	16	1.49
(1,1193) 1:A:90:ASP:HB3 1:A:90:ASP:HB3 16 1.49	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	16	1.49
(1,1193) 1:A:90:ASP:HB2 1:A:90:ASP:HB2 17 1.49	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	17	1.49
(1,1193) 1:A:90:ASP:HB2 1:A:90:ASP:HB3 17 1.49	(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	17	1.49



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

Key	Atom-1	$\mathbf{Atom} extbf{-2}$	Model	Violation (Å)
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	17	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	17	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	18	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	18	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	18	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	18	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	19	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	19	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	19	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	19	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	20	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	20	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	20	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	20	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	21	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	21	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	21	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	21	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	22	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	22	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	22	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	22	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	23	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	23	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	23	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	23	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	24	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	24	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	24	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	24	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	25	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	25	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	25	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	25	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	26	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	26	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	26	1.49
	:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	26	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	27	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	27	1.49
( / /	:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	27	1.49
(1,1193) 1:A	:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	27	1.49



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	28	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	28	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	28	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	28	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	29	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	29	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	29	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	29	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	30	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	30	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	30	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	30	1.49
(1,555)	1:A:96:ASN:H	1:A:92:ASN:HD22	19	1.48
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	6	1.48
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	6	1.48
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	6	1.48
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	6	1.48
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	6	1.48
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	6	1.48
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	6	1.48
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	6	1.48
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	6	1.48
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	6	1.48
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	22	1.47
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	1	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	1	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	1	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	1	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	2	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	2	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	2	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	2	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	3	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	3	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	3	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	3	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	4	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	4	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	4	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	4	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	5	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	5	1.46



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

(1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         5         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         5         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB2         6         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         6         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         6         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         6         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         6         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         <	
(1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB2         6         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         6         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         6         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         6         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         <	
(1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         6         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         6         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         6         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB2         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         <	
(1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         6         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         6         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB2         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         <	
(1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         6         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB2         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         1         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         <	
(1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB2         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         10         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         10         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3	
(1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB2         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         10         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         10         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         1         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3	
(1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB2         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         10         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3	
(1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         7         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB2         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB2         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         10         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         10         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         10         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         11         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3	
(1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB2         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         10         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         10         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         10         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         11         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         11         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3	
(1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB2         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         10         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         10         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         10         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         11         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         11         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         11         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3	
(1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         8         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB2         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         9         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         10         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         10         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         10         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         11         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         11         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         11         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         11         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3	
(1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       8       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB2       9       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB3       9       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB2       9       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       9       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB3       10       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB3       10       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       10       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB2       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46	
(1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB2       9       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB3       9       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB2       9       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       9       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       9       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB3       10       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB2       10       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       10       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46	
(1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB3       9       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB2       9       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       9       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB2       10       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB3       10       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB2       10       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       10       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46	
(1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB2       9       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       9       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB2       10       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB3       10       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB2       10       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       10       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB2       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46	
(1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       9       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB2       10       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB3       10       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB2       10       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       10       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB2       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46	
(1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB2       10       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB3       10       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB2       10       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       10       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB2       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB2       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46	
(1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB3       10       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB2       10       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       10       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB2       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB2       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46	
(1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB2       10       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       10       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB2       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB2       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46	
(1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       10       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB2       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB2       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46	
(1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB2       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB2       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46	
(1,652)       1:A:10:ASP:HB2       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB2       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46	
(1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB2       11       1.46         (1,652)       1:A:10:ASP:HB3       1:A:10:ASP:HB3       11       1.46	
(1,652) 1:A:10:ASP:HB3 1:A:10:ASP:HB3 11 1.46	
( , , ,	
(1.652) 1:A:10:ASP:HB2 1:A:10:ASP:HB2 12 1.46	
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1	
(1,652) 1:A:10:ASP:HB2 1:A:10:ASP:HB3 12 1.46	
(1,652) 1:A:10:ASP:HB3 1:A:10:ASP:HB2 12 1.46	
(1,652) 1:A:10:ASP:HB3 1:A:10:ASP:HB3 12 1.46	
(1,652) 1:A:10:ASP:HB2 1:A:10:ASP:HB2 13 1.46	
(1,652) 1:A:10:ASP:HB2 1:A:10:ASP:HB3 13 1.46	
(1,652) 1:A:10:ASP:HB3 1:A:10:ASP:HB2 13 1.46	
(1,652) 1:A:10:ASP:HB3 1:A:10:ASP:HB3 13 1.46	
(1,652) 1:A:10:ASP:HB2 1:A:10:ASP:HB2 14 1.46	
(1,652) 1:A:10:ASP:HB2 1:A:10:ASP:HB3 14 1.46	
(1,652) 1:A:10:ASP:HB3 1:A:10:ASP:HB2 14 1.46	
(1,652) 1:A:10:ASP:HB3 1:A:10:ASP:HB3 14 1.46	
(1,652) 1:A:10:ASP:HB2 1:A:10:ASP:HB2 15 1.46	
(1,652) 1:A:10:ASP:HB2 1:A:10:ASP:HB3 15 1.46	
(1,652) 1:A:10:ASP:HB3 1:A:10:ASP:HB2 15 1.46	
(1,652) 1:A:10:ASP:HB3 1:A:10:ASP:HB3 15 1.46	



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	16	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	16	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	16	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	16	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	17	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	17	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	17	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	17	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	18	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	18	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	18	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	18	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	19	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	19	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	19	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	19	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	20	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	20	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	20	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	20	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	21	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	21	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	21	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	21	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	22	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	22	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	22	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	22	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	23	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	23	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	23	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	23	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	24	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	24	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	24	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	24	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	25	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	25	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	25	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	25	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	26	1.46
	1.71.10.71.01 .1102	1.71.10.7101 .11102		1, 10



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

(1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         26         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         26         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB2         27         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         27         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         27         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         27         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         28         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         28         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         28         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         28         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         28         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3 </th <th>Key</th> <th>Atom-1</th> <th>Atom-2</th> <th>Model</th> <th>Violation (Å)</th>	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB2         27         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         27         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         27         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         27         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         28         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3 </td <td>(1,652)</td> <td>1:A:10:ASP:HB3</td> <td>1:A:10:ASP:HB2</td> <td>26</td> <td>1.46</td>	(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	26	1.46
(1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         27         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         27         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         27         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         28         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3 </td <td>(1,652)</td> <td>1:A:10:ASP:HB3</td> <td>1:A:10:ASP:HB3</td> <td>26</td> <td>1.46</td>	(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	26	1.46
(1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         27         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         27         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB2         28         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         28         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         28         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         28         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3 </td <td>(1,652)</td> <td>1:A:10:ASP:HB2</td> <td>1:A:10:ASP:HB2</td> <td>27</td> <td>1.46</td>	(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	27	1.46
(1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB2         28         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         28         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         28         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         28         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         28         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3 </td <td>(1,652)</td> <td>1:A:10:ASP:HB2</td> <td>1:A:10:ASP:HB3</td> <td>27</td> <td>1.46</td>	(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	27	1.46
(1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         28         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         28         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         28         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         28         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,452)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3 </td <td>(1,652)</td> <td>1:A:10:ASP:HB3</td> <td>1:A:10:ASP:HB2</td> <td>27</td> <td>1.46</td>	(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	27	1.46
(1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         28         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         28         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB2         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2 </td <td>(1,652)</td> <td>1:A:10:ASP:HB3</td> <td>1:A:10:ASP:HB3</td> <td>27</td> <td>1.46</td>	(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	27	1.46
(1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         28         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         28         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB2         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB2         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3	(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	28	1.46
(1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         28         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB2         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,462)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86         1:A:86         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86         1:A:86         1:A:86         1         1.46           (1,416)	(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	28	1.46
(1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3 <td>(1,652)</td> <td>1:A:10:ASP:HB3</td> <td>1:A:10:ASP:HB2</td> <td>28</td> <td>1.46</td>	(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	28	1.46
(1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB2         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:46         1.416         1:A:86:LEU:HB3         1:A:46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         1:A:46         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         1:A:46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         2:A:46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         2:A:46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         3:A:46	(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	28	1.46
(1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         29         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:46         1.46 <t< td=""><td>(1,652)</td><td>1:A:10:ASP:HB2</td><td>1:A:10:ASP:HB2</td><td>29</td><td>1.46</td></t<>	(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	29	1.46
(1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         1:A:6           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB2         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,46)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         3	(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	29	1.46
(1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB2         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         1.46	(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	29	1.46
(1,652)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB2         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         1.46           (1,416) <td>(1,652)</td> <td>1:A:10:ASP:HB3</td> <td>1:A:10:ASP:HB3</td> <td>29</td> <td>1.46</td>	(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	29	1.46
(1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3	(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	30	1.46
(1,652)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:10:ASP:HB3         30         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         3         1.46           (1,416)         1:A:86:	(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	30	1.46
(1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         4         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         4         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         <	(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	30	1.46
(1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         4         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         4         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         <	(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	30	1.46
(1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         4         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         4         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         5         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         <	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	1	1.46
(1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         4         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         4         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         4         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         5         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         <	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	1	1.46
(1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         2         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         4         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         4         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         4         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         4         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         5         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         5         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         <	(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	1	1.46
(1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       2       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       2       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       2       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       3       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       3       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       3       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       3       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3 </td <td>(1,416)</td> <td>1:A:86:LEU:HB3</td> <td>1:A:86:LEU:HB3</td> <td>1</td> <td>1.46</td>	(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	1	1.46
(1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       2       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       2       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       3       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       3       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       3       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       3       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3 </td <td>(1,416)</td> <td>1:A:86:LEU:HB2</td> <td>1:A:86:LEU:HB2</td> <td>2</td> <td>1.46</td>	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	2	1.46
(1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       2       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       3       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       3       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       3       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       3       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3 </td <td>(1,416)</td> <td>1:A:86:LEU:HB2</td> <td>1:A:86:LEU:HB3</td> <td>2</td> <td>1.46</td>	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	2	1.46
(1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       3       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       3       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       3       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       3       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3 </td <td>(1,416)</td> <td>1:A:86:LEU:HB3</td> <td>1:A:86:LEU:HB2</td> <td>2</td> <td>1.46</td>	(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	2	1.46
(1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       3       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       3       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       3       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3 </td <td>(1,416)</td> <td>1:A:86:LEU:HB3</td> <td>1:A:86:LEU:HB3</td> <td>2</td> <td>1.46</td>	(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	2	1.46
(1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       3       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       3       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2 </td <td>(1,416)</td> <td>1:A:86:LEU:HB2</td> <td>1:A:86:LEU:HB2</td> <td>3</td> <td>1.46</td>	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	3	1.46
(1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       3       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       6       1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	1	1.46
(1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       6       1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	3	1.46
(1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       6       1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	3	1.46
(1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       6       1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	4	1.46
(1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       4       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       6       1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	4	1.46
(1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       6       1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	4	1.46
(1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       6       1.46					1.46
(1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       6       1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	5	1.46
(1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       5       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       6       1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	5	1.46
(1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       6       1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	5	1.46
(1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       6       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       6       1.46	( / /	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	1	1.46
(1,416) 1:A:86:LEU:HB3 1:A:86:LEU:HB2 6 1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	6	1.46
	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	6	1.46
(4.440) 4.4.00 I DILLIIDO 4.4.00 I DILLIIDO	(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	6	1.46
(1,416)   1:A:86:LEU:HB3   1:A:86:LEU:HB3   6   1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	6	1.46



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

(1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         7         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         7         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         7         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         7         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         7         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         8         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         8         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         8         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         7         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         7         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         8         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         8         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         8         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         8         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         8         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	7	1.46
(1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         7         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         8         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         8         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         8         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         8         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	7	1.46
(1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         1:A:66           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         8         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         8         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         8         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         1         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         11	(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	7	1.46
(1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         8         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         8         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         8         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3	(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	7	1.46
(1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         8         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	8	1.46
(1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         8         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         10         1.46         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         12         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3 <th< td=""><td>(1,416)</td><td>1:A:86:LEU:HB2</td><td>1:A:86:LEU:HB3</td><td>8</td><td>1.46</td></th<>	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	8	1.46
(1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         12         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         12         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3	(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	8	1.46
(1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         11         1.46         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         12         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         12         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         12         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         <	(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	8	1.46
(1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         12         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         12         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         12         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	9	1.46
(1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         9         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         12         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         12         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         12         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         13         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3 <td>(1,416)</td> <td>1:A:86:LEU:HB2</td> <td>1:A:86:LEU:HB3</td> <td>9</td> <td>1.46</td>	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	9	1.46
(1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         12         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         12         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         12         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         13         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         13         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         13         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3 </td <td>(1,416)</td> <td>1:A:86:LEU:HB3</td> <td>1:A:86:LEU:HB2</td> <td>9</td> <td>1.46</td>	(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	9	1.46
(1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         12         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         12         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         12         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         13         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         13         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         13         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3 </td <td>(1,416)</td> <td>1:A:86:LEU:HB3</td> <td>1:A:86:LEU:HB3</td> <td>9</td> <td>1.46</td>	(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	9	1.46
(1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         10         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         12         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         12         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         12         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         13         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         13         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         13         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         13         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3 </td <td>(1,416)</td> <td>1:A:86:LEU:HB2</td> <td>1:A:86:LEU:HB2</td> <td>10</td> <td>1.46</td>	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	10	1.46
(1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       10       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       11       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       11       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       11       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       11       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       12       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       12       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       12       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	10	1.46
(1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       10       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       11       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       11       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       11       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       11       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       12       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       12       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       12       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:	(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	10	1.46
(1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         12         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         12         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         12         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         12         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         13         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         13         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         13         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         13         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         14         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         14         1.46		1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	10	1.46
(1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         11         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         12         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         12         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         12         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         12         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         13         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB2         13         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         13         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB3         1:A:86:LEU:HB3         13         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB2         14         1.46           (1,416)         1:A:86:LEU:HB2         1:A:86:LEU:HB3         14         1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	11	1.46
(1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       11       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       12       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       12       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       12       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       12       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       14       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       14       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       14       1.46		1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	11	1.46
(1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       12       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       12       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       12       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       12       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       14       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       14       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       14       1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	11	1.46
(1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       12       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       12       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       12       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       14       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       14       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       14       1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	11	1.46
(1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       12       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       12       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       14       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       14       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       14       1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	12	1.46
(1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       12       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       14       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       14       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       14       1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	12	1.46
(1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       14       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       14       1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	12	1.46
(1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       14       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       14       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       14       1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	12	1.46
(1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB2       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       14       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       14       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       14       1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	13	1.46
(1,416)       1:A:86:LEU:HB3       1:A:86:LEU:HB3       13       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       14       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       14       1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	13	1.46
(1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB2       14       1.46         (1,416)       1:A:86:LEU:HB2       1:A:86:LEU:HB3       14       1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	13	1.46
(1,416) 1:A:86:LEU:HB2 1:A:86:LEU:HB3 14 1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	13	1.46
	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	14	1.46
	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	14	1.46
(1,416)   1:A:86:LEU:HB3   1:A:86:LEU:HB2   14   1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	14	1.46
(1,416) 1:A:86:LEU:HB3 1:A:86:LEU:HB3 14 1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	14	1.46
(1,416) 1:A:86:LEU:HB2 1:A:86:LEU:HB2 15 1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	15	1.46
(1,416) 1:A:86:LEU:HB2 1:A:86:LEU:HB3 15 1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	15	1.46
(1,416) 1:A:86:LEU:HB3 1:A:86:LEU:HB2 15 1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	15	1.46
(1,416) 1:A:86:LEU:HB3 1:A:86:LEU:HB3 15 1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	15	1.46
(1,416) 1:A:86:LEU:HB2 1:A:86:LEU:HB2 16 1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	16	1.46
(1,416) 1:A:86:LEU:HB2 1:A:86:LEU:HB3 16 1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	16	1.46
(1,416) 1:A:86:LEU:HB3 1:A:86:LEU:HB2 16 1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	16	1.46
(1,416) 1:A:86:LEU:HB3 1:A:86:LEU:HB3 16 1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	16	1.46
(1,416) 1:A:86:LEU:HB2 1:A:86:LEU:HB2 17 1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	17	1.46
(1,416) 1:A:86:LEU:HB2 1:A:86:LEU:HB3 17 1.46	(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	17	1.46



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	17	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	17	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	18	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	18	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	18	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	18	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	19	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	19	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	19	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	19	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	20	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	20	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	20	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	20	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	21	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	21	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	21	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	21	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	22	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	22	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	22	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	22	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	23	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	23	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	23	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	23	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	24	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	24	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	24	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	24	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	25	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	25	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	25	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	25	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	26	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	26	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	26	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	26	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	27	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	27	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	27	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	27	1.46



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	28	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	28	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	28	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	28	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	29	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	29	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	29	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	29	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	30	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	30	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	30	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	30	1.46
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	1	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	1	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	1	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	1	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	2	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	2	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	2	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	2	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	3	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	3	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	3	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	3	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	4	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	4	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	4	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	4	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	5	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	5	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	5	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	5	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	6	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	6	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	6	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	6	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	7	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	7	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	7	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	7	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	8	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	8	1.45



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	8	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	8	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	9	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	9	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	9	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	9	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	10	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	10	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	10	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	10	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	11	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	11	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	11	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	11	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	12	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	12	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	12	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	12	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	13	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	13	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	13	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	13	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	14	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	14	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	14	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	14	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	15	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	15	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	15	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	15	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	16	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	16	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	16	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	16	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	17	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	17	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	17	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	17	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	18	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	18	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	18	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	18	1.45



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	19	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	19	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	19	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	19	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	20	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	20	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	20	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	20	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	21	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	21	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	21	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	21	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	22	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	22	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	22	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	22	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	23	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	23	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	23	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	23	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	24	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	24	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	24	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	24	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	25	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	25	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	25	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	25	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	26	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	26	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	26	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	26	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	27	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	27	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	27	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	27	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	28	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	28	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	28	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	28	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	29	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	29	1.45



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	29	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	29	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	30	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	30	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	30	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	30	1.45
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	1	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	1	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	1	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	1	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	2	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	2	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	2	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	2	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	3	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	3	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	3	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	3	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	4	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	4	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	4	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	4	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	5	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	5	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	5	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	5	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	6	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	6	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	6	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	6	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	7	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	7	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	7	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	7	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	8	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	8	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	8	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	8	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	9	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	9	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	9	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	9	1.44



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	10	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	10	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	10	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	10	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	11	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	11	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	11	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	11	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	12	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	12	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	12	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	12	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	13	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	13	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	13	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	13	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	14	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	14	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	14	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	14	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	15	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	15	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	15	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	15	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	16	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	16	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	16	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	16	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	17	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	17	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	17	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	17	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	18	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	18	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	18	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	18	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	19	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	19	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	19	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	19	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	20	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	20	1.44



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	20	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	20	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	21	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	21	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	21	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	21	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	22	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	22	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	22	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	22	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	23	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	23	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	23	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	23	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	24	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	24	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	24	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	24	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	25	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	25	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	25	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	25	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	26	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	26	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	26	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	26	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	27	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	27	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	27	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	27	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	28	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	28	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	28	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	28	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	29	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	29	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	29	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	29	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	30	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	30	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	30	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	30	1.44



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,74)	1:A:85:VAL:HG21	1:A:108:PHE:HE1	10	1.43
(1,74)	1:A:85:VAL:HG21	1:A:108:PHE:HE2	10	1.43
(1,74)	1:A:85:VAL:HG22	1:A:108:PHE:HE1	10	1.43
(1,74)	1:A:85:VAL:HG22	1:A:108:PHE:HE2	10	1.43
(1,74)	1:A:85:VAL:HG23	1:A:108:PHE:HE1	10	1.43
(1,74)	1:A:85:VAL:HG23	1:A:108:PHE:HE2	10	1.43
(1,921)	1:A:86:LEU:HA	1:A:85:VAL:HG11	10	1.42
(1,921)	1:A:86:LEU:HA	1:A:85:VAL:HG12	10	1.42
(1,921)	1:A:86:LEU:HA	1:A:85:VAL:HG13	10	1.42
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	13	1.42
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	13	1.42
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	13	1.42
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	13	1.42
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	13	1.42
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	13	1.42
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	6	1.42
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	6	1.42
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	6	1.42
(1,168)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:18:CYS:HB2	28	1.41
(1,168)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:18:CYS:HB3	28	1.41
(1,168)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:18:CYS:HB2	28	1.41
(1,168)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:18:CYS:HB3	28	1.41
(1,168)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:18:CYS:HB2	28	1.41
(1,168)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:18:CYS:HB3	28	1.41
(1,832)	1:A:70:HIS:HD2	1:A:70:HIS:H	22	1.4
(1,168)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:18:CYS:HB2	18	1.4
(1,168)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:18:CYS:HB3	18	1.4
(1,168)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:18:CYS:HB2	18	1.4
(1,168)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:18:CYS:HB3	18	1.4
(1,168)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:18:CYS:HB2	18	1.4
(1,168)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:18:CYS:HB3	18	1.4
(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH11	4	1.4
(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH12	4	1.4
(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH21	4	1.4
(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH22	4	1.4
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	27	1.4
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	1	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	1	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	1	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	1	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	2	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	2	1.39



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	2	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	2	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	3	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	3	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	3	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	3	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	4	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	4	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	4	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	4	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	5	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	5	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	5	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	5	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	6	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	6	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	6	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	6	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	7	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	7	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	7	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	7	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	8	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	8	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	8	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	8	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	9	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	9	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	9	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	9	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	10	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	10	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	10	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	10	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	11	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	11	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	11	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	11	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	12	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	12	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	12	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	12	1.39
/	<u> </u>			d on mort mage



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	13	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	13	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	13	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	13	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	14	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	14	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	14	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	14	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	15	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	15	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	15	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	15	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	16	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	16	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	16	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	16	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	17	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	17	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	17	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	17	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	18	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	18	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	18	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	18	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	19	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	19	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	19	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	19	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	20	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	20	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	20	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	20	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	21	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	21	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	21	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	21	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	22	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	22	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	22	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	22	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	23	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	23	1.39



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	23	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	23	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	24	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	24	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	24	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	24	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	25	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	25	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	25	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	25	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	26	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	26	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	26	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	26	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	27	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	27	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	27	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	27	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	28	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	28	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	28	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	28	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	29	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	29	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	29	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	29	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	30	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	30	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	30	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	30	1.39
(1,580)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:65:VAL:HG11	6	1.39
(1,580)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:65:VAL:HG12	6	1.39
(1,580)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:65:VAL:HG13	6	1.39
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	21	1.39
(1,832)	1:A:70:HIS:HD2	1:A:70:HIS:H	14	1.38
(1,580)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:65:VAL:HG11	13	1.38
(1,580)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:65:VAL:HG12	13	1.38
(1,580)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:65:VAL:HG13	13	1.38
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	29	1.37
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	29	1.37
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	29	1.37
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	8	1.36



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	8	1.36
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	8	1.36
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	8	1.36
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	8	1.36
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	8	1.36
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	8	1.36
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	8	1.36
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	8	1.36
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:51:PHE:HD1	18	1.36
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:51:PHE:HD2	18	1.36
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:51:PHE:HD1	18	1.36
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:51:PHE:HD2	18	1.36
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:51:PHE:HD1	18	1.36
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:51:PHE:HD2	18	1.36
(1,832)	1:A:70:HIS:HD2	1:A:70:HIS:H	30	1.35
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	8	1.35
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	30	1.35
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	30	1.35
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	30	1.35
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	27	1.32
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	27	1.32
(1,1550)	1:A:52:ASN:HD21	1:A:57:PHE:H	25	1.32
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	21	1.29
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	21	1.29
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	21	1.29
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	21	1.29
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	21	1.29
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	21	1.29
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	21	1.29
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	21	1.29
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	21	1.29
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	10	1.26
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	10	1.26
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	10	1.26
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	1	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	1	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	1	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	1	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	2	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	2	1.25
(1,1151)		1 A FO ACD IIDO	0	1.05
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	2 2	1.25



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	3	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	3	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	3	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	3	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	4	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	4	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	4	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	4	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	5	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	5	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	5	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	5	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	6	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	6	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	6	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	6	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	7	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	7	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	7	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	7	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	8	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	8	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	8	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	8	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	9	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	9	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	9	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	9	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	10	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	10	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	10	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	10	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	11	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	11	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	11	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	11	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	12	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	12	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	12	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	12	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	13	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	13	1.25



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	13	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	13	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	14	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	14	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	14	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	14	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	15	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	15	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	15	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	15	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	16	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	16	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	16	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	16	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	17	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	17	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	17	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	17	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	18	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	18	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	18	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	18	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	19	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	19	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	19	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	19	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	20	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	20	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	20	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	20	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	21	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	21	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	21	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	21	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	22	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	22	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	22	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	22	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	23	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	23	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	23	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	23	1.25



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	24	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	24	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	24	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	24	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	25	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	25	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	25	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	25	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	26	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	26	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	26	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	26	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	27	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	27	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	27	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	27	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	28	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	28	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	28	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	28	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	29	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	29	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	29	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	29	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	30	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	30	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	30	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	30	1.25
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	10	1.25
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	14	1.25
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	1	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	1	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	1	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	1	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	1	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	1	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	1	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	1	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	1	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	22	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	22	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	22	1.24



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	22	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	22	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	22	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	22	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	22	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	22	1.24
(1,832)	1:A:70:HIS:HD2	1:A:70:HIS:H	13	1.21
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	3	1.21
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	3	1.21
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	3	1.21
(1,832)	1:A:70:HIS:HD2	1:A:70:HIS:H	12	1.2
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	23	1.2
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	23	1.2
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	23	1.2
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	28	1.2
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	28	1.2
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	28	1.2
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	5	1.2
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	5	1.2
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	5	1.2
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	5	1.2
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	5	1.2
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	5	1.2
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	5	1.2
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	5	1.2
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	5	1.2
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	16	1.19
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	16	1.19
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	16	1.19
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	16	1.19
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	16	1.19
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	16	1.19
(1,832)	1:A:70:HIS:HD2	1:A:70:HIS:H	18	1.19
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	25	1.19
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	25	1.19
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	25	1.19
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	3	1.19
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	3	1.19
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	3	1.19
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	3	1.19
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	3	1.19
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	3	1.19



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

(1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG21 3 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG22 3 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG23 3 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG21 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG22 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG22 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG23 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:7:THR:HG23 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:7:THR:HG21 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:7:THR:HG22 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:7:THR:HG23 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG23 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG21 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG22 15 1.19 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 1 1.18 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 1 1.18 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 1 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 12 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 12 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 12 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 21 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 21 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 2 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 3 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 3 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 3 1.17 (1,1476) 1:A	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         15         1.19           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         15         1.19           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG22         15         1.19           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         15         1.19           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG22         15         1.19           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         15         1.19           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         15         1.19           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         15         1.19           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         15         1.19           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         15         1.19           (1,1112)         1:A:3:9:VAL:HG13         1:A:3:3:THR:HG22         1         1.18           (1,509)         1:A:9:1:LYS:HB3         1:A:9:3:THR:HG22         1         1.18           (1,509)         1:A:9:LYS:HB3         1:A:9:THR:HG23         1         1.18           (1,1476)         1:A:8:9:VAL:HG11 <td< td=""><td>(1,1112)</td><td>1:A:5:VAL:HG13</td><td>1:A:7:THR:HG21</td><td>3</td><td>1.19</td></td<>	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	3	1.19
(1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG21 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG22 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG23 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:7:THR:HG21 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:7:THR:HG21 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:7:THR:HG21 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:7:THR:HG22 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG23 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG23 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG21 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG21 15 1.19 (1,509) 1:A:9:L:IVS:HB3 1:A:93:THR:HG21 1 1.18 (1,509) 1:A:9:L:IVS:HB3 1:A:93:THR:HG21 1 1.18 (1,509) 1:A:9:L:IVS:HB3 1:A:93:THR:HG21 1 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 12 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 21 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 2 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 2 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 3 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 6 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 6 1.17 (	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	3	1.19
(1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG22 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG23 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:7:THR:HG21 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:7:THR:HG21 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:7:THR:HG23 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG22 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG21 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG22 15 1.19 (1,110) 1:A:9:1:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 1 1.18 (1,509) 1:A:9:1:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 1 1.18 (1,509) 1:A:9:1:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 1 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 12 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 21 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 2 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 2 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 3 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 6 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 6 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 6 1.17 (1	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	3	1.19
(1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG23         15         1.19           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG21         15         1.19           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG22         15         1.19           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG21         15         1.19           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         15         1.19           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         15         1.19           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         15         1.19           (1,112)         1:A:9:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         15         1.19           (1,509)         1:A:9!LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         1         1.18           (1,509)         1:A:9!LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         1         1.18           (1,476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         12         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         12         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         21         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	15	1.19
(1,1112) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:7:THR:HG21 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:7:THR:HG22 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:7:THR:HG23 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG23 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG21 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG22 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG23 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG23 15 1.19 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 1 1.18 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 1 1.18 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 1 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 12 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG12 1:A:63:PRO:HG3 12 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 12 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 12 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 21 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 21 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 21 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 21 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 21 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE21 17 1.18 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 29 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 29 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 29 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 2 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 2 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 2 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 3 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 3 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 6 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 6 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 13 1.17 (1,	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	15	1.19
(1,1112) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:7:THR:HG22 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG23 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG21 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG21 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG22 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG23 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG23 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG23 15 1.19 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 1 1.18 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 1 1.18 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 1 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 12 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG12 1:A:63:PRO:HG3 12 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 12 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 21 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:59:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:59:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE21 17 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 29 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 2 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 2 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 2 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 3 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 3 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 3 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 6 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 1 1.17 (1,147	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	15	1.19
(1,1112) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:7:THR:HG23 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG21 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG22 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG22 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG23 15 1.19 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 1 1.18 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 1 1.18 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 1 1.18 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 1 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 12 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 21 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 21 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG12 1:A:63:PRO:HG3 21 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 21 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG12 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE21 17 1.18 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE21 17 1.18 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE21 17 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 2 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 2 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 2 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 2 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 3 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 6 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 1 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 1 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 6 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 1 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 1 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 6 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 1 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 1 1.17	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	15	1.19
(1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG21 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG22 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG23 15 1.19 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 1 1.18 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 1 1.18 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 1 1.18 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 1 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 12 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG12 1:A:63:PRO:HG3 12 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 12 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 12 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 21 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 21 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG12 1:A:63:PRO:HG3 21 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 21 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE21 17 1.18 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE21 17 1.18 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 29 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 2 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 2 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 2 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 2 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 3 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 3 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 3 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 6 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 3 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 6 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 1 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 1 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 1 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 6 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 1 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 1 1.17	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	15	1.19
(1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG22 15 1.19 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG23 15 1.19 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 1 1.18 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 1 1.18 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 1 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 12 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG12 1:A:63:PRO:HG3 12 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 12 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 12 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 12 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 12 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 21 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 21 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 21 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE21 17 1.18 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE21 17 1.18 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE21 17 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE21 17 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 2 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 3 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 3 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 6 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 6 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 1 1.17	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	15	1.19
(1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         15         1.19           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         1         1.18           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         1         1.18           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         1         1.18           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         1         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         12         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         12         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         21         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         21         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         21         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11 <t< td=""><td>(1,1112)</td><td>1:A:5:VAL:HG13</td><td>1:A:7:THR:HG21</td><td>15</td><td>1.19</td></t<>	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	15	1.19
(1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         1         1.18           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         1         1.18           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         1         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         12         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         12         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         21         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         21         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         21         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         21         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1476)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	15	1.19
(1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 1 1.18 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 1 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 12 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG12 1:A:63:PRO:HG3 12 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 12 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 12 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 21 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG12 1:A:63:PRO:HG3 21 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 21 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 29 1.18 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE21 17 1.18 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE21 17 1.18 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE21 17 1.18 (1,1039) 1:A:111:ASN:HD21 1:A:107:CYS:HA 16 1.17 (1,1520) 1:A:111:ASN:HD21 1:A:108:PHE:HA 16 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 2 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 2 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 2 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 2 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 3 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 6 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 3 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 6 1.17 (1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 13 1.17	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	15	1.19
(1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         1         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         12         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         12         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         12         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         21         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         21         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         21         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:10:REPHE:HA         16         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	1	1.18
(1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         12         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         12         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         12         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         21         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         21         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         21         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:107:CYS:HA         16         1.17           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         16         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	1	1.18
(1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         12         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         12         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         21         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         21         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:107:CYS:HA         16         1.17           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         16         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         2         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	1	1.18
(1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         12         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         21         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         21         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         21         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:107:CYS:HA         16         1.17           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:108:PHE:HA         16         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         2         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         2         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11	(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	12	1.18
(1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         21         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         21         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         21         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:6:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:6:VAL:HG13	(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	12	1.18
(1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         21         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         21         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:107:CYS:HA         16         1.17           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         16         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         2         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         2         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         3         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11	(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	12	1.18
(1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         21         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:107:CYS:HA         16         1.17           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         16         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         2         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         2         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         3         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         3         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12	(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	21	1.18
(1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:107:CYS:HA         16         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         2         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         2         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         3         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         3         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         6         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13	(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	21	1.18
(1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:107:CYS:HA         16         1.17           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         16         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         2         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         2         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         3         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         3         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         6         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         6         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13	(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	21	1.18
(1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         29         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         16         1.17           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         16         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         2         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         2         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         3         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         6         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         6         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         6         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11	(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	29	1.18
(1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:107:CYS:HA         16         1.17           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         16         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         2         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         2         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         3         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         3         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         6         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         6         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         6         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         13         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12	(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	29	1.18
(1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:107:CYS:HA         16         1.17           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         16         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         2         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         2         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         3         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         3         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         6         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         6         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         6         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         13         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         13         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12	(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	29	1.18
(1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         17         1.18           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:107:CYS:HA         16         1.17           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         16         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         2         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         2         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         3         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         3         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         6         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         6         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         6         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         13         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         13         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         13         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12	(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	17	1.18
(1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:107:CYS:HA         16         1.17           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         16         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         2         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         2         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         3         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         3         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         3         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         6         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         6         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         13         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         13         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         13         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         13         1.17	(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	17	1.18
(1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         16         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         2         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         2         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         3         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         3         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         3         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         6         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         6         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         6         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         13         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         13         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         13         1.17           (1,1476)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         13         1.17	(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	17	1.18
(1,1476)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       2       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       2       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       2       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       3       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       3       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       6       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       6       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       6       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17	(1,1520)	1:A:111:ASN:HD21	1:A:107:CYS:HA	16	1.17
(1,1476)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       2       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       2       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       3       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       3       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       6       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       6       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       6       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17	(1,1520)	1:A:111:ASN:HD21	1:A:108:PHE:HA	16	1.17
(1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       2       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       3       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       3       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       6       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       6       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       6       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17	(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	2	1.17
(1,1476)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       3       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       3       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       3       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       6       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       6       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17	(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	2	1.17
(1,1476)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       3       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       3       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       6       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       6       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       6       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17	(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	2	1.17
(1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       3       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       6       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       6       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       6       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17	(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	3	1.17
(1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       3       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       6       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       6       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       6       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17	(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	3	1.17
(1,1476)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       6       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       6       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       6       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17		1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	3	1.17
(1,1476)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       6       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       6       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17		1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	6	1.17
(1,1476)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17		1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	6	1.17
(1,1476)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17         (1,1476)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       13       1.17	(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	6	1.17
(1,1476) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 13 1.17	(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	13	1.17
	(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	13	1.17
(1,1476) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 15 1.17	(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	13	1.17
	(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	15	1.17



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

( )	A:89:VAL:HG12	1 A C2 DDO 11O2		
(1,1476) 1:		1:A:63:PRO:HG3	15	1.17
1 \ / / / 1	A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	15	1.17
(1,1476) 1:	A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	24	1.17
(1,1476) 1:	A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	24	1.17
(1,1476) 1:	A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	24	1.17
(1,1466) 1:	A:85:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HB2	10	1.17
(1,1466) 1:	A:85:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HB2	10	1.17
(1,1466) 1:	A:85:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HB2	10	1.17
(1,1466) 1	:A:68:LEU:HG	1:A:85:VAL:HG11	10	1.17
(1,1466) 1	:A:68:LEU:HG	1:A:85:VAL:HG12	10	1.17
(1,1466) 1	:A:68:LEU:HG	1:A:85:VAL:HG13	10	1.17
(1,1039) 1	:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	20	1.16
(1,1039) 1	:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	20	1.16
(1,1039) 1	:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	20	1.16
(1,1476) 1:	A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	5	1.15
(1,1476) 1:	A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	5	1.15
(1,1476) 1:	A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	5	1.15
(1,1476) 1:	A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	10	1.15
(1,1476) 1:	A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	10	1.15
(1,1476) 1:	A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	10	1.15
(1,1476) 1:	A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	11	1.15
(1,1476) 1:	A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	11	1.15
(1,1476) 1:	A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	11	1.15
(1,1476) 1:	A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	19	1.15
(1,1476) 1:	A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	19	1.15
(1,1476) 1:	A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	19	1.15
(1,1476) 1:	A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	26	1.15
(1,1476) 1:	A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	26	1.15
(1,1476) 1:	A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	26	1.15
(1,1476) 1:	A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	27	1.15
(1,1476) 1:	A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	27	1.15
(1,1476) 1:	A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	27	1.15
(1,1039) 1	:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	26	1.15
(1,1039) 1	:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	26	1.15
(1,1039) 1	:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	26	1.15
(1,832) 1	:A:70:HIS:HD2	1:A:70:HIS:H	17	1.14
(1,1476) 1:	A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	4	1.14
	A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	4	1.14
(1,1476) 1:	A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	4	1.14
(1,1476) 1:	A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	14	1.14
(1,1476) 1:	A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	14	1.14
(1,1476) 1:	A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	14	1.14



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	16	1.14
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	16	1.14
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	16	1.14
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	20	1.14
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	20	1.14
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	20	1.14
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	18	1.14
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	18	1.14
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	18	1.14
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	25	1.14
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	25	1.14
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	25	1.14
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	25	1.14
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	25	1.14
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	25	1.14
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	25	1.14
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	25	1.14
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	25	1.14
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	1	1.14
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	1	1.14
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	1	1.14
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	18	1.13
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	18	1.13
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	18	1.13
(1,1550)	1:A:52:ASN:HD21	1:A:57:PHE:H	28	1.12
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	17	1.12
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	17	1.12
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	17	1.12
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	29	1.12
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	29	1.12
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	29	1.12
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	29	1.12
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	29	1.12
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	29	1.12
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	29	1.12
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	29	1.12
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	29	1.12
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	5	1.12
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	5	1.12
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	5	1.12
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	10	1.12
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	10	1.12



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	10	1.12
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	11	1.11
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	11	1.11
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	11	1.11
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	6	1.11
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	6	1.11
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	6	1.11
(1,832)	1:A:70:HIS:HD2	1:A:70:HIS:H	11	1.1
(1,424)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:15:ARG:HA	18	1.1
(1,424)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:15:ARG:HA	18	1.1
(1,424)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:15:ARG:HA	18	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	13	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	13	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	13	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	13	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	13	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	13	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	13	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	13	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	13	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	24	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	24	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	24	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	24	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	24	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	24	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	24	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	24	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	24	1.1
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	4	1.1
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	8	1.1
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	8	1.1
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	8	1.1
(1,319)	1:A:66:ASP:H	1:A:65:VAL:HB	6	1.09
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	11	1.09
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	11	1.09
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	11	1.09
(1,832)	1:A:70:HIS:HD2	1:A:70:HIS:H	28	1.08
(1,319)	1:A:66:ASP:H	1:A:65:VAL:HB	13	1.08
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	18	1.08
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	18	1.08
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	18	1.08



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	28	1.08
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	28	1.08
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	28	1.08
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	29	1.08
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	29	1.08
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	29	1.08
(1,376)	1:A:65:VAL:HG21	1:A:65:VAL:H	13	1.07
(1,376)	1:A:65:VAL:HG22	1:A:65:VAL:H	13	1.07
(1,376)	1:A:65:VAL:HG23	1:A:65:VAL:H	13	1.07
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	8	1.07
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	8	1.07
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	8	1.07
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	4	1.07
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	4	1.07
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	4	1.07
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	4	1.07
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	4	1.07
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	4	1.07
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	4	1.07
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	4	1.07
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	4	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	15	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	15	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	15	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	16	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	16	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	16	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	21	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	21	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	21	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	22	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	22	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	22	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	25	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	25	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	25	1.07
(1,376)	1:A:65:VAL:HG21	1:A:65:VAL:H	6	1.06
(1,376)	1:A:65:VAL:HG22	1:A:65:VAL:H	6	1.06
(1,376)	1:A:65:VAL:HG23	1:A:65:VAL:H	6	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	9	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	9	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	9	1.06
, ,	- <del>-</del>			d on next nage



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	9	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	9	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	9	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	9	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	9	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	9	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	20	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	20	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	20	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	20	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	20	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	20	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	20	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	20	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	20	1.06
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	12	1.06
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	13	1.06
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	13	1.06
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	13	1.06
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	14	1.06
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	14	1.06
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	14	1.06
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	26	1.06
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	26	1.06
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	26	1.06
(1,832)	1:A:70:HIS:HD2	1:A:70:HIS:H	16	1.04
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	22	1.04
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	22	1.04
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	22	1.04
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	14	1.04
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	14	1.04
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	14	1.04
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	21	1.04
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	21	1.04
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	21	1.04
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	2	1.03
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	2	1.03
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	2	1.03
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	9	1.03
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	9	1.03
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	9	1.03
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	23	1.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	23	1.03
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	23	1.03
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	24	1.03
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	24	1.03
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	24	1.03
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	22	1.02
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG21	26	1.02
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG22	26	1.02
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG23	26	1.02
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	10	1.02
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	10	1.02
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	10	1.02
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	10	1.02
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	10	1.02
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	10	1.02
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	10	1.02
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	10	1.02
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	10	1.02
(1,1440)	1:A:84:GLU:HA	1:A:87:LYS:HD2	29	1.01
(1,1440)	1:A:84:GLU:HA	1:A:87:LYS:HD3	29	1.01
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	13	1.01
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	22	1.01
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	1	1.01
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	8	1.01
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	8	1.01
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	8	1.01
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	7	1.01
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	7	1.01
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	7	1.01
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	17	1.01
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	17	1.01
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	17	1.01
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	30	1.01
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	30	1.01
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	30	1.01
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	26	1.0
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	3	1.0
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	3	1.0
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	3	1.0
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	4	1.0
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	4	1.0
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	4	1.0
, ,			Continue	



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	12	1.0
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	12	1.0
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	12	1.0
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	20	1.0
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	20	1.0
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	20	1.0
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	15	0.99
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	16	0.99
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	27	0.99
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	27	0.99
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	27	0.99
(1,712)	1:A:65:VAL:HA	1:A:85:VAL:HG11	10	0.98
(1,712)	1:A:65:VAL:HA	1:A:85:VAL:HG12	10	0.98
(1,712)	1:A:65:VAL:HA	1:A:85:VAL:HG13	10	0.98
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	30	0.98
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	30	0.98
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	30	0.98
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	30	0.98
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	30	0.98
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	30	0.98
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	3	0.98
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	3	0.98
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	3	0.98
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	24	0.98
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	24	0.98
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	24	0.98
(1,145)	1:A:95:ASN:HA	1:A:92:ASN:HD22	19	0.98
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	6	0.98
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	25	0.98
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	25	0.98
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	25	0.98
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	21	0.96
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	21	0.96
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	21	0.96
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	17	0.96
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	17	0.96
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	17	0.96
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	17	0.96
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	17	0.96
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	17	0.96
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	17	0.96
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	17	0.96



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	17	0.96
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	5	0.96
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	5	0.96
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	5	0.96
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:51:PHE:HD1	28	0.96
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:51:PHE:HD2	28	0.96
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:51:PHE:HD1	28	0.96
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:51:PHE:HD2	28	0.96
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:51:PHE:HD1	28	0.96
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:51:PHE:HD2	28	0.96
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	19	0.96
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	19	0.96
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	19	0.96
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	25	0.95
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	25	0.95
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	25	0.95
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	30	0.95
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	30	0.95
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	30	0.95
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	12	0.95
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	1	0.95
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	6	0.95
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	11	0.95
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	12	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	16	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	16	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	16	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	16	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	16	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	16	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	16	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	16	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	16	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	28	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	28	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	28	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	28	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	28	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	28	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	28	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	28	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	28	0.95



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

(1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         14         0.94           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         14         0.94           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         14         0.94           (1,1159)         1:A:13:LEU:HG         1:A:117:LYS:HE2         7         0.94           (1,159)         1:A:13:LEU:HG         1:A:117:LYS:HE2         17         0.94           (1,856)         1:A:70:HIS:H         1:A:69:VAL:HB         1         0.93           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         24         0.93           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         24         0.93           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         24         0.93           (1,1443)         1:A:7:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         26         0.93           (1,1443)         1:A:7:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         26         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)<	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         14         0.94           (1,1159)         1:A:113:LEU:HG         1:A:117:LYS:HE2         7         0.94           (1,1159)         1:A:113:LEU:HG         1:A:117:LYS:HE2         17         0.94           (1,1856)         1:A:70:HIS:H         1:A:69:VAL:HB2         17         0.93           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         12         0.93           (1,1547)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:LU:HB2         24         0.93           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LU:HD21         26         0.93           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LU:HD22         26         0.93           (1,1443)         1:A:7:GLN:HG3         1:A:56:LU:HD23         26         0.93           (1,1443)         1:A:7:GLN:HG3         1:A:56:LU:HD23         26         0.93           (1,1443)         1:A:7:GLN:HG3         1:A:56:LU:HD23         27         0.93           (1,1142)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         27	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	14	0.94
(1,1159)         1:A:113:LEU:HG         1:A:117:LYS:HE2         7         0.94           (1,1159)         1:A:113:LEU:HG         1:A:117:LYS:HE2         17         0.94           (1,856)         1:A:70:HIS:H         1:A:69:VAL:HB         1         0.93           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:38:PRO:HD2         24         0.93           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         24         0.93           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB3         24         0.93           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         26         0.93           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         26         0.93           (1,1412)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         27         0.93 </td <td>(1,1443)</td> <td>1:A:71:GLN:HG3</td> <td>1:A:56:LEU:HD22</td> <td>14</td> <td>0.94</td>	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	14	0.94
(1,1159)	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	14	0.94
(1,856)         1:A:70:HIS:H         1:A:69:VAL:HB         1         0.93           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:38:PRO:HD2         24         0.93           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:36:GLU:HB2         24         0.93           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         26         0.93           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         26         0.93           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         26         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,11039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A	(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	7	0.94
(1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:38:PRO:HD2         24         0.93           (1,1547)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB2         24         0.93           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         26         0.93           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         26         0.93           (1,1412)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:TGLN:HE21         24         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13	(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	17	0.94
(1,1547)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB2         24         0.93           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         26         0.93           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         26         0.93           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         26         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:TGLN:HE21         24         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13 <td< td=""><td>(1,856)</td><td>1:A:70:HIS:H</td><td>1:A:69:VAL:HB</td><td>1</td><td>0.93</td></td<>	(1,856)	1:A:70:HIS:H	1:A:69:VAL:HB	1	0.93
(1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         26         0.93           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         26         0.93           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         26         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:GLN:HE21         24         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13 <td< td=""><td>(1,1547)</td><td>1:A:36:GLU:HB2</td><td>1:A:38:PRO:HD2</td><td>24</td><td>0.93</td></td<>	(1,1547)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:38:PRO:HD2	24	0.93
(1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         26         0.93           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         26         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:GLN:HE21         24         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:GLN:HE21         24         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:GLN:HE21         24         0.93           (1,478)         1:A:5:VAL:HG13         1	(1,1547)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB2	24	0.93
(1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         26         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:TGLN:HE21         24         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:TGLN:HE21         24         0.93           (1,478)         1:A:5:OVAL:HG21         1:A:46:TYR:HE1         28         0.92           (1,478)         1:A:5:OVAL:HG21 <td< td=""><td>(1,1443)</td><td>1:A:71:GLN:HG3</td><td>1:A:56:LEU:HD21</td><td>26</td><td>0.93</td></td<>	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	26	0.93
(1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:TGLN:HE21         24         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:TGLN:HE21         24         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:TGLN:HE21         24         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:GLN:HE21         24         0.93           (1,478)         1:A:5:VAL:HG21	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	26	0.93
(1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         24         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         24         0.93           (1,4039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         24         0.93           (1,4039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:46:TYR:HE1         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:46:TYR:HE1         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23 <td< td=""><td>(1,1443)</td><td>1:A:71:GLN:HG3</td><td>1:A:56:LEU:HD23</td><td>26</td><td>0.93</td></td<>	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	26	0.93
(1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         24         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         24         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:46:TYR:HE21         24         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:47:T:GLN:HE21         24         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:46:TYR:HE21         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:46:TYR:HE21         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG22	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	27	0.93
(1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         24         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         24         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         24         0.93           (1,478)         1:A:5:0:VAL:HG21         1:A:46:TYR:HE1         28         0.92           (1,478)         1:A:5:0:VAL:HG21         1:A:46:TYR:HE1         28         0.92           (1,478)         1:A:5:0:VAL:HG22         1:A:46:TYR:HE1         28         0.92           (1,478)         1:A:5:0:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE1         28         0.92           (1,478)         1:A:5:VAL:HG23	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	27	0.93
(1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         24         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         24         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         24         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:46:TYR:HE21         24         0.93           (1,478)         1:A:5:0:VAL:HG21         1:A:46:TYR:HE21         28         0.92           (1,478)         1:A:5:0:VAL:HG22         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:5:0:VAL:HG22         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:5:0:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:5:0:VAL:HG23	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	27	0.93
(1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         24         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         24         0.93           (1,478)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:46:TYR:HE1         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG31         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:5:VAL:HG31         1	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	27	0.93
(1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG21         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         24         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         24         0.93           (1,478)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:46:TYR:HE1         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG33         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	27	0.93
(1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         27         0.93           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         24         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         24         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         24         0.93           (1,478)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:46:TYR:HE21         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:5:VAL:HG3	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	27	0.93
(1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         27         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         24         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         24         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         24         0.93           (1,478)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:46:TYR:HE1         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:46:TYR:HE1         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:71:GLN:HE22         10         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11 <td< td=""><td>(1,1112)</td><td>1:A:5:VAL:HG13</td><td>1:A:7:THR:HG21</td><td>27</td><td>0.93</td></td<>	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	27	0.93
(1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         24         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         24         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         24         0.93           (1,478)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:46:TYR:HE1         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:46:TYR:HE1         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE1         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:71:GLN:HE22         10         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         10         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         20         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13 <td< td=""><td>(1,1112)</td><td>1:A:5:VAL:HG13</td><td>1:A:7:THR:HG22</td><td>27</td><td>0.93</td></td<>	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	27	0.93
(1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         24         0.93           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         24         0.93           (1,478)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:46:TYR:HE1         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:46:TYR:HE1         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE1         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:71:GLN:HE22         10         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         10         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         10         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         20         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	27	0.93
(1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         24         0.93           (1,478)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:46:TYR:HE1         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:46:TYR:HE1         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE1         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:71:GLN:HE22         10         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         10         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         10         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         20         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         20         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1	(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	24	0.93
(1,478)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:46:TYR:HE1         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:46:TYR:HE1         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE1         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         10         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         10         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         20         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         20         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         20         0.92           (1,207)         1:A:61:GLU:HB3         1:A	(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	24	0.93
(1,478)         1:A:50:VAL:HG21         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:46:TYR:HE1         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE1         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         10         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         10         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         20         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         20         0.92           (1,179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:71:GLN:HE22         20         0.92           (1,1159)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:107:CYS:HA         30         0.91           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21 <t< td=""><td>(1,1039)</td><td>1:A:5:VAL:HG13</td><td>1:A:71:GLN:HE21</td><td>24</td><td>0.93</td></t<>	(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	24	0.93
(1,478)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:46:TYR:HE1         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE1         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         10         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         10         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         20         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         20         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         20         0.92           (1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         1         0.92           (1,1159)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:107:CYS:HA         30         0.91           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         30         0.91           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3 <td< td=""><td>(1,478)</td><td>1:A:50:VAL:HG21</td><td>1:A:46:TYR:HE1</td><td>28</td><td>0.92</td></td<>	(1,478)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:46:TYR:HE1	28	0.92
(1,478)         1:A:50:VAL:HG22         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE1         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         10         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         10         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         20         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         20         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         20         0.92           (1,207)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:71:GLN:HE22         20         0.92           (1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         1         0.92           (1,1159)         1:A:113:LEU:HG         1:A:107:CYS:HA         30         0.91           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         30         0.91           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         3         0.91           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1	(1,478)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:46:TYR:HE2	28	0.92
(1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE1         28         0.92           (1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         10         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         10         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         10         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         20         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         20         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         20         0.92           (1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:71:GLN:HE22         20         0.92           (1,1159)         1:A:113:LEU:HG         1:A:117:LYS:HE2         9         0.92           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         30         0.91           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         3         0.91           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         3         0.91	(1,478)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:46:TYR:HE1	28	0.92
(1,478)         1:A:50:VAL:HG23         1:A:46:TYR:HE2         28         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         10         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         10         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         20         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         20         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         20         0.92           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         20         0.92           (1,179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         1         0.92           (1,1159)         1:A:113:LEU:HG         1:A:117:LYS:HE2         9         0.92           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:107:CYS:HA         30         0.91           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         3         0.91           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         3         0.91	(1,478)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:46:TYR:HE2	28	0.92
(1,207)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:71:GLN:HE22       10       0.92         (1,207)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:71:GLN:HE22       10       0.92         (1,207)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:71:GLN:HE22       10       0.92         (1,207)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:71:GLN:HE22       20       0.92         (1,207)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:71:GLN:HE22       20       0.92         (1,207)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:71:GLN:HE22       20       0.92         (1,1179)       1:A:61:GLU:HB3       1:A:58:ASP:HB3       1       0.92         (1,1159)       1:A:113:LEU:HG       1:A:117:LYS:HE2       9       0.92         (1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:107:CYS:HA       30       0.91         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       3       0.91         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       3       0.91	(1,478)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:46:TYR:HE1	28	0.92
(1,207)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:71:GLN:HE22       10       0.92         (1,207)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:71:GLN:HE22       10       0.92         (1,207)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:71:GLN:HE22       20       0.92         (1,207)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:71:GLN:HE22       20       0.92         (1,207)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:71:GLN:HE22       20       0.92         (1,1179)       1:A:61:GLU:HB3       1:A:58:ASP:HB3       1       0.92         (1,1159)       1:A:113:LEU:HG       1:A:117:LYS:HE2       9       0.92         (1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:107:CYS:HA       30       0.91         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       3       0.91         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       3       0.91	(1,478)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:46:TYR:HE2	28	0.92
(1,207)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:71:GLN:HE22       10       0.92         (1,207)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:71:GLN:HE22       20       0.92         (1,207)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:71:GLN:HE22       20       0.92         (1,207)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:71:GLN:HE22       20       0.92         (1,1179)       1:A:61:GLU:HB3       1:A:58:ASP:HB3       1       0.92         (1,1159)       1:A:113:LEU:HG       1:A:117:LYS:HE2       9       0.92         (1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:107:CYS:HA       30       0.91         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       3       0.91         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       3       0.91	(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	10	0.92
(1,207)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:71:GLN:HE22       20       0.92         (1,207)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:71:GLN:HE22       20       0.92         (1,207)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:71:GLN:HE22       20       0.92         (1,1179)       1:A:61:GLU:HB3       1:A:58:ASP:HB3       1       0.92         (1,1159)       1:A:113:LEU:HG       1:A:117:LYS:HE2       9       0.92         (1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:107:CYS:HA       30       0.91         (1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:108:PHE:HA       30       0.91         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       3       0.91         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       3       0.91	(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	10	0.92
(1,207)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:71:GLN:HE22       20       0.92         (1,207)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:71:GLN:HE22       20       0.92         (1,1179)       1:A:61:GLU:HB3       1:A:58:ASP:HB3       1       0.92         (1,1159)       1:A:113:LEU:HG       1:A:117:LYS:HE2       9       0.92         (1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:107:CYS:HA       30       0.91         (1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:108:PHE:HA       30       0.91         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       3       0.91         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       3       0.91	(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	10	0.92
(1,207)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:71:GLN:HE22       20       0.92         (1,1179)       1:A:61:GLU:HB3       1:A:58:ASP:HB3       1       0.92         (1,1159)       1:A:113:LEU:HG       1:A:117:LYS:HE2       9       0.92         (1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:107:CYS:HA       30       0.91         (1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:108:PHE:HA       30       0.91         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       3       0.91         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       3       0.91	(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	20	0.92
(1,1179)       1:A:61:GLU:HB3       1:A:58:ASP:HB3       1       0.92         (1,1159)       1:A:113:LEU:HG       1:A:117:LYS:HE2       9       0.92         (1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:107:CYS:HA       30       0.91         (1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:108:PHE:HA       30       0.91         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       3       0.91         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       3       0.91	(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	20	0.92
(1,1159)       1:A:113:LEU:HG       1:A:117:LYS:HE2       9       0.92         (1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:107:CYS:HA       30       0.91         (1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:108:PHE:HA       30       0.91         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       3       0.91         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       3       0.91	(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	20	0.92
(1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:107:CYS:HA       30       0.91         (1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:108:PHE:HA       30       0.91         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       3       0.91         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       3       0.91	(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	1	0.92
(1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:108:PHE:HA       30       0.91         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       3       0.91         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       3       0.91	(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	9	0.92
(1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       3       0.91         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       3       0.91	(1,1520)	1:A:111:ASN:HD21	1:A:107:CYS:HA	30	0.91
(1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 3 0.91	(1,1520)	1:A:111:ASN:HD21	1:A:108:PHE:HA	30	0.91
	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	3	0.91
(1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD23 3 0.91	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	3	0.91
	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	3	0.91



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	9	0.91
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	19	0.91
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	19	0.91
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	19	0.91
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	19	0.91
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	19	0.91
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	19	0.91
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	19	0.91
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	19	0.91
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	19	0.91
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	8	0.9
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	23	0.9
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	5	0.9
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	18	0.9
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	30	0.9
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	30	0.9
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	30	0.9
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	30	0.9
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	30	0.9
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	30	0.9
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	30	0.9
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	30	0.9
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	30	0.9
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	18	0.9
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	18	0.9
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	18	0.9
(1,615)	1:A:86:LEU:H	1:A:85:VAL:HB	10	0.89
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	25	0.89
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	8	0.89
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	14	0.89
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	19	0.89
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	28	0.89
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	18	0.89
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	7	0.88
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	7	0.88
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	7	0.88
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	23	0.88
(1,809)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:64:LEU:HA	13	0.87
(1,809)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:64:LEU:HA	13	0.87
(1,809)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:64:LEU:HA	13	0.87
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	30	0.87
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	30	0.87



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	30	0.87
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	16	0.87
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	16	0.87
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	16	0.87
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	16	0.87
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	2	0.87
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	2	0.87
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	2	0.87
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	2	0.87
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	2	0.87
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	2	0.87
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	2	0.87
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	2	0.87
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	2	0.87
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	27	0.87
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	27	0.87
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	27	0.87
(1,204)	1:A:87:LYS:H	1:A:87:LYS:HG3	25	0.86
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	17	0.86
(1,809)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:64:LEU:HA	7	0.85
(1,809)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:64:LEU:HA	7	0.85
(1,809)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:64:LEU:HA	7	0.85
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	21	0.85
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	21	0.85
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	21	0.85
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	14	0.85
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	14	0.85
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	14	0.85
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	14	0.85
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	14	0.85
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	14	0.85
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	14	0.85
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	14	0.85
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	14	0.85
(1,424)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:15:ARG:HA	28	0.84
(1,424)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:15:ARG:HA	28	0.84
(1,424)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:15:ARG:HA	28	0.84
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	12	0.84
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	12	0.84
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	12	0.84
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	14	0.84
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	14	0.84



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	14	0.84
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	24	0.84
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	25	0.84
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	12	0.83
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	12	0.83
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	12	0.83
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	12	0.83
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	12	0.83
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	12	0.83
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	12	0.83
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	12	0.83
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	12	0.83
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	11	0.83
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	11	0.83
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	11	0.83
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	22	0.83
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	22	0.83
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	22	0.83
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	23	0.83
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	23	0.83
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	23	0.83
(1,1569)	1:A:8:THR:HG21	1:A:12:GLN:HG2	21	0.82
(1,1569)	1:A:8:THR:HG22	1:A:12:GLN:HG2	21	0.82
(1,1569)	1:A:8:THR:HG23	1:A:12:GLN:HG2	21	0.82
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	17	0.82
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	20	0.82
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	23	0.82
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	23	0.82
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	23	0.82
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	23	0.82
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	23	0.82
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	23	0.82
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	23	0.82
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	23	0.82
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	23	0.82
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	16	0.82
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	16	0.82
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	16	0.82
(1,729)	1:A:91:LYS:H	1:A:91:LYS:HG3	18	0.81
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	9	0.81
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	9	0.81
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	9	0.81



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

(1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 29 0.81 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 25 0.8 (1,207) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE22 25 0.8 (1,207) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE22 25 0.8 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:71:GLN:HE22 25 0.8 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD21 1 0.8 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 1 0.8 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 1 0.8 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD23 1 0.8 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 1 0 0.8 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 10 0.8 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 10 0.8 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 10 0.8 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD23 10 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 7 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 14 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 14 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:71:GLN:HE21 12 0.7 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:71:GLN:HE21 12 0.7 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,1597) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,1597) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,1597) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:64:LEU:HA 29 0.77 (1,1520) 1:A:111:ASN:HD21 1:A:107:CYS:HA 20 0.78 (1,1597) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:64:LEU:HA 29 0.77 (1,1520) 1:A:111:ASN:HD21 1:A:107:CYS:HA 20 0.78 (1,1597) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:64:LEU:HA 29 0.77 (1,1530) 1:A:111:ASN:HD21 1:A:107:CYS:HA 20 0.77 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:66	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         25         0.8           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         25         0.8           (1,207)         1:A:5:VAL:HG3         1:A:56:LEU:HD22         1         0.8           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         1         0.8           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         10         0.8           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         10         0.8           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         10         0.8           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         10         0.8           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         10         0.8           (1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         7         0.8           (1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:71:GLN:HE21         12         0.8           (1,1039)         1:A:54:LHG12         1:A:71:GLN:HE21         12         0.8           (1,1039)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:71:GLN:HE21         12         0.8           (1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:7:GN:HE2	(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	29	0.81
(1,207)	(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	25	0.8
(1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD21 1 0.8 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 1 0.8 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD23 1 0.8 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD21 10 0.8 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD21 10 0.8 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 10 0.8 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 10 0.8 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD23 10 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 7 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 14 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 16 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 16 0.8 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1039) 1:A:6:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 11 0.79 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 11 0.79 (1,1179) 1:A:61:GLU:HD3 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,809) 1:A:64:LEU:HD22 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,809) 1:A:64:LEU:HD22 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,809) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD2 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD2 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1507) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE2 22 0.78 (1,1507) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE2 22 0.78 (1,1507) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:64:LEU:HA 20 0.78 (1,1509) 1:A:64:LEU:HD22 1:A:14:TYR:HE2 22 0.78 (1,1509) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:64:LEU:HA 20 0.77 (1,1520) 1:A:111:ASN:HD21 1:A:107:CYS:HA 20 0.77 (1,1520) 1:A:111:ASN:HD21 1:A:107:CYS:HA 20 0.77 (1,1520) 1:A:111:ASN:HD21 1:A:64:LEU:HA 29 0.77 (1,1520) 1:A:111:ASN:HD21 1:A:66:LEU:HD2 20 0.77 (1,1520) 1:A:111:ASN:HD21 1:A:66:LEU:HD2 20 0.77 (1,1520) 1:A:111:ASN:HD21 1:A:66:LEU:HD2 20 0.77 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD2 80 0.77 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD2 80 0.77 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:	(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	25	0.8
(1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 1 0.8 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD23 1 0.8 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD21 10 0.8 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 10 0.8 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 10 0.8 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD23 10 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:56:LEU:HD23 10 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 7 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 14 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 16 0.8 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 11 0.79 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 11 0.79 (1,1179) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,809) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,809) 1:A:64:LEU:HD22 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,809) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD2 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD2 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1590) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:19:NHB21 1:A:19:NHB21 1:A:107:CYS:HA 20 0.78 (1,1590) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:64:LEU:HA 20 0.78 (1,1590) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:64:LEU:HA 20 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1590) 1:A:11:ASN:HD21 1:A:107:CYS:HA 20 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE2 20 0.78 (1,1590) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:64:LEU:HA 20 0.78 (1,1590) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:64:LEU:HA 20 0.77 (1,1500) 1:A:11:ASN:HD21 1:A:64:LEU:HA 20 0.77 (1,1500) 1:A:11:ASN:HD21 1:A:64:LEU:HA 20 0.77 (1,1500) 1:A:11:ASN:HD21 1:A:64:LEU:HA 20 0.77 (1,1510) 1:A:11:ASN:HD21 1:A:64:LEU:HA 20 0.77 (1,1520) 1:A:11:ASN:HD21 1:A:66:LEU:HD22 8 0.77 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 9 0.77 (1,144	(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	25	0.8
(1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD23 1 0.8 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD21 10 0.8 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 10 0.8 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 10 0.8 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD23 10 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:56:LEU:HD23 10 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 7 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 14 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 16 0.8 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 11 0.79 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 11 0.79 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,809) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,809) 1:A:64:LEU:HD22 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,809) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,1597) 1:A:63:LYS:HD3 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1597) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1597) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1597) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:14:TYR:HE2 22 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE2 22 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE3 20 0.78 (1,1597) 1:A:13:13:AS:HD21 1:A:108:PHE:HA 20 0.77 (1,1520) 1:A:111:ASN:HD21 1:A:108:PHE:HA 12 0.77 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 8 0.77 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD21 9 0.77 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 9 0.77 (1,1443) 1:A:71:G	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	1	0.8
(1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD21 10 0.8 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 10 0.8 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD23 10 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 7 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 14 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 14 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 16 0.8 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1039) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 11 0.79 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 11 0.79 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 11 0.79 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 11 0.79 (1,809) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,809) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,809) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD2 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD2 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD2 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE2 22 0.78 (1,1509) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:64:LEU:HA 29 0.77 (1,1520) 1:A:111:ASN:HD21 1:A:107:CYS:HA 20 0.78 (1,1597) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:64:LEU:HA 29 0.77 (1,1520) 1:A:111:ASN:HD21 1:A:16:CLU:HA 29 0.77 (1,1520) 1:A:111:ASN:HD21 1:A:16:CLU:HA 29 0.77 (1,1533) 1:A:9:GU:HA 1:A:12:GLN:HG2 20 0.77 (1,1533) 1:A:9:GU:HA 1:A:12:GLN:HG2 20 0.77 (1,1520) 1:A:111:ASN:HD21 1:A:108:PHE:HA 20 0.77 (1,1520) 1:A:111:ASN:HD21 1:A:66:LEU:HA 29 0.77 (1,1520) 1:A:111:ASN:HD21 1:A:60:LEU:HA 29 0.77 (1,1520) 1:A:111:ASN:HD21 1:A:60:LEU:HA 29 0.77 (1,1533) 1:A:9:GU:HA 1:A:108:PHE:HA 12 0.77 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:66:LEU:HD22 8 0.77 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:66:LEU:HD22 9 0.77 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:66:LEU:HD22 9 0.77 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:66:LEU:HD22 9 0.77 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 9 0.77 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 9 0.77 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	1	0.8
(1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 10 0.8 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD23 10 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 7 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 14 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 16 0.8 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1039) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 11 0.79 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 11 0.79 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 11 0.79 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,809) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,809) 1:A:64:LEU:HD22 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD2 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD2 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1507) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1507) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:14:TYR:HE2 22 0.78 (1,1507) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1507) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE2 22 0.78 (1,1507) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE2 22 0.78 (1,1509) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:64:LEU:HA 20 0.78 (1,1509) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:14:TYR:HE2 22 0.78 (1,1509) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:14:TYR:HE2 22 0.78 (1,1509) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:14:TYR:HE2 20 0.77 (1,1509) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:64:LEU:HA 29 0.77 (1,1509) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:64:LEU:HA 29 0.77 (1,1509) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:66:LEU:HA 29 0.77 (1,1509) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:66:LEU:HD23 8 0.77 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:66:LEU:HD23 8 0.77 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:66:LEU:HD23 9 0.77 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:66:L	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	1	0.8
(1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD23 10 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 7 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 14 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 16 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 16 0.8 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 11 0.79 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 11 0.79 (1,1179) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,809) 1:A:64:LEU:HD22 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,809) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD2 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD2 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1507) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1507) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1507) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1507) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1507) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1507) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE2 22 0.78 (1,1509) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:64:LEU:HA 20 0.78 (1,1500) 1:A:111:ASN:HD21 1:A:108:PHE:HA 20 0.78 (1,1500) 1:A:111:ASN:HD21 1:A:108:PHE:HA 20 0.78 (1,1500) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:64:LEU:HA 29 0.77 (1,1809) 1:A:64:LEU:HD22 1:A:64:LEU:HA 29 0.77 (1,1809) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:64:LEU:HA 29 0.77 (1,1500) 1:A:111:ASN:HD21 1:A:108:PHE:HA 20 0.77 (1,1500) 1:A:111:ASN:HD21 1:A:64:LEU:HA 29 0.77 (1,1500) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:66:LEU:HA 29 0.77 (1,1500) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:66:LEU:HA 29 0.77 (1,1510) 1:A:111:ASN:HD21 1:A:66:LEU:HD21 8 0.77 (1,1510) 1:A:111:ASN:HD21 1:A:108:PHE:HA 12 0.77 (1,1510) 1:A:111:ASN:HD31 1:A:66:LEU:HD21 8 0.77 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD21 9 0.77 (1,1443) 1:A:71	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	10	0.8
(1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 7 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 14 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 16 0.8 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 11 0.79 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 11 0.79 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 11 0.79 (1,1179) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,809) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,809) 1:A:64:LEU:HD22 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,1509) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD2 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD2 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE2 22 0.78 (1,1590) 1:A:11:ASN:HD21 1:A:107:CYS:HA 20 0.78 (1,1520) 1:A:11:ASN:HD21 1:A:107:CYS:HA 20 0.78 (1,1510) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:64:LEU:HA 20 0.78 (1,1510) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:64:LEU:HA 20 0.78 (1,1510) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:64:LEU:HA 20 0.78 (1,1510) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:64:LEU:HA 20 0.78 (1,1510) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:64:LEU:HA 20 0.78 (1,1510) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:64:LEU:HA 20 0.77 (1,1510) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:64:LEU:HA 20 0.77 (1,1510) 1:A:11:ASN:HD21 1:A:64:LEU:HA 20 0.77 (1,1510) 1:A:11:ASN:HD21 1:A:64:LEU:HA 20 0.77 (1,1510) 1:A:11:ASN:HD21 1:A:64:LEU:HA 20 0.77 (1,1510) 1:A:11:ASN:HD21 1:A:64:LEU:HA 20 0.77 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:66:LEU:HD22 8 0.77 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 9 0.77 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 9 0.77 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 9 0.77 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 9 0.77	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	10	0.8
(1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 14 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 16 0.8 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE21 12 0.8 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 11 0.79 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 11 0.79 (1,1179) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,809) 1:A:64:LEU:HD22 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,809) 1:A:64:LEU:HD22 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,809) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:64:LEU:HA 12 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD2 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD2 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE1 22 0.78 (1,1520) 1:A:11:ASN:HD21 1:A:107:CYS:HA 20 0.78 (1,1520) 1:A:11:ASN:HD21 1:A:108:PHE:HA 20 0.78 (1,150) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:64:LEU:HA 20 0.78 (1,150) 1:A:64:LEU:HD31 1:A:108:PHE:HA 20 0.78 (1,150) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:108:PHE:HA 20 0.77 (1,809) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:64:LEU:HA 29 0.77 (1,809) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:64:LEU:HA 29 0.77 (1,809) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:64:LEU:HA 29 0.77 (1,1533) 1:A:9:GLU:HB3 1:A:64:LEU:HA 29 0.77 (1,1533) 1:A:9:GLU:HB3 1:A:64:LEU:HA 29 0.77 (1,1533) 1:A:9:GLU:HB3 1:A:64:LEU:HA 29 0.77 (1,1544) 1:A:28:TYR:HA 1:A:31:LYS:HG3 27 0.77 (1,1544) 1:A:28:TYR:HA 1:A:31:LYS:HG3 27 0.77 (1,1544) 1:A:11:ASN:HD21 1:A:66:LEU:HA 29 0.77 (1,1544) 1:A:11:ASN:HD21 1:A:66:LEU:HD22 20 0.77 (1,1544) 1:A:11:ASN:HD21 1:A:66:LEU:HD22 20 0.77 (1,1544) 1:A:11:ASN:HD21 1:A:66:LEU:HD22 20 0.77 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 8 0.77 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 9 0.77	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	10	0.8
(1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         16         0.8           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         12         0.8           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         12         0.8           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         12         0.8           (1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         11         0.79           (1,1179)         1:A:64:LEU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         21         0.79           (1,1179)         1:A:64:LEU:HD21         1:A:64:LEU:HA         12         0.78           (1,809)         1:A:64:LEU:HD22         1:A:64:LEU:HA         12         0.78           (1,809)         1:A:64:LEU:HD23         1:A:64:LEU:HA         12         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1597)         1:A:63:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A	(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	7	0.8
(1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         12         0.8           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         12         0.8           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         12         0.8           (1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         11         0.79           (1,1179)         1:A:64:LEU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         21         0.79           (1,809)         1:A:64:LEU:HD21         1:A:64:LEU:HA         12         0.78           (1,809)         1:A:64:LEU:HD22         1:A:64:LEU:HA         12         0.78           (1,809)         1:A:64:LEU:HD23         1:A:64:LEU:HA         12         0.78           (1,809)         1:A:64:LEU:HD23         1:A:64:LEU:HA         12         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE1         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1597)         1:A:63:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:	(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	14	0.8
(1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         12         0.8           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         12         0.8           (1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         11         0.79           (1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:64:LEU:HA         12         0.79           (1,809)         1:A:64:LEU:HD21         1:A:64:LEU:HA         12         0.78           (1,809)         1:A:64:LEU:HD22         1:A:64:LEU:HA         12         0.78           (1,809)         1:A:64:LEU:HD23         1:A:64:LEU:HA         12         0.78           (1,809)         1:A:64:LEU:HD23         1:A:64:LEU:HA         12         0.78           (1,974)         1:A:64:LEU:HD23         1:A:64:LEU:HA         12         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE1         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1597)         1:A:64:LEU:HD3         1:A:107:	(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	16	0.8
(1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         12         0.8           (1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         11         0.79           (1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         21         0.79           (1,809)         1:A:64:LEU:HD21         1:A:64:LEU:HA         12         0.78           (1,809)         1:A:64:LEU:HD22         1:A:64:LEU:HA         12         0.78           (1,809)         1:A:64:LEU:HD23         1:A:64:LEU:HA         12         0.78           (1,809)         1:A:64:LEU:HD23         1:A:64:LEU:HA         12         0.78           (1,274)         1:A:63:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE3         24         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1597)         1:A:63:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1597)         1:A:63:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         20         0.78           (1,1590)         1:A:61:LB:HD21         1:A:107	(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	12	0.8
(1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         11         0.79           (1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         21         0.79           (1,809)         1:A:64:LEU:HD21         1:A:64:LEU:HA         12         0.78           (1,809)         1:A:64:LEU:HD22         1:A:64:LEU:HA         12         0.78           (1,809)         1:A:64:LEU:HD23         1:A:64:LEU:HA         12         0.78           (1,274)         1:A:28:TYR:HA         1:A:31:LYS:HG3         24         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE1         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1597)         1:A:63:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1597)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:107:CYS:HA         20         0.78           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,809)         1:A:64:LEU:HD23         1:A:64	(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	12	0.8
(1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         21         0.79           (1,809)         1:A:64:LEU:HD21         1:A:64:LEU:HA         12         0.78           (1,809)         1:A:64:LEU:HD22         1:A:64:LEU:HA         12         0.78           (1,809)         1:A:64:LEU:HD23         1:A:64:LEU:HA         12         0.78           (1,274)         1:A:28:TYR:HA         1:A:31:LYS:HG3         24         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1597)         1:A:63:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1590)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:107:CYS:HA         20         0.78           (1,1520)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,809)         1:A:64:LEU:HD21         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,809)         1:A:64:LEU:HD23         1:A:64:LE	(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	12	0.8
(1,809)         1:A:64:LEU:HD21         1:A:64:LEU:HA         12         0.78           (1,809)         1:A:64:LEU:HD22         1:A:64:LEU:HA         12         0.78           (1,809)         1:A:64:LEU:HD23         1:A:64:LEU:HA         12         0.78           (1,274)         1:A:28:TYR:HA         1:A:31:LYS:HG3         24         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE1         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1597)         1:A:63:LYS:HD3         1:A:107:CYS:HA         20         0.78           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         20         0.78           (1,179)         1:A:64:LEU:HB3         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,809)         1:A:64:LEU:HD21         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,809)         1:A:64:LEU:HD23         1:A:64:L	(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	11	0.79
(1,809)         1:A:64:LEU:HD22         1:A:64:LEU:HA         12         0.78           (1,809)         1:A:64:LEU:HD23         1:A:64:LEU:HA         12         0.78           (1,274)         1:A:28:TYR:HA         1:A:31:LYS:HG3         24         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE1         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1520)         1:A:11:ASN:HD21         1:A:107:CYS:HA         20         0.78           (1,1520)         1:A:11:ASN:HD21         1:A:64:SASP:HB3         19         0.78           (1,179)         1:A:64:LEU:HD21         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,809)         1:A:64:LEU:HD22         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,809)         1:A:64:LEU:HD23         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,153)         1:A:9:GLY:HA         1:A:31:LY	(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	21	0.79
(1,809)         1:A:64:LEU:HD23         1:A:64:LEU:HA         12         0.78           (1,274)         1:A:28:TYR:HA         1:A:31:LYS:HG3         24         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:107:CYS:HA         20         0.78           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         20         0.78           (1,179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,809)         1:A:64:LEU:HD21         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,809)         1:A:64:LEU:HD23         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,1530)         1:A:64:LEU:HD23         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,1533)         1:A:9:GLU:HA         1:A:107:CYS:HA         12         0.77           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:1	(1,809)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:64:LEU:HA	12	0.78
(1,274)         1:A:28:TYR:HA         1:A:31:LYS:HG3         24         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE1         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:107:CYS:HA         20         0.78           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         20         0.78           (1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         19         0.78           (1,809)         1:A:64:LEU:HD21         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,809)         1:A:64:LEU:HD22         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,809)         1:A:64:LEU:HD23         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,1530)         1:A:69:GLU:HA         1:A:111:ASN:HD21         1:A:107:CYS:HA         12         0.77           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:107:CYS:HA         12         0.77           (1,1520)	(1,809)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:64:LEU:HA	12	0.78
(1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE1         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:107:CYS:HA         20         0.78           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         20         0.78           (1,1520)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         19         0.78           (1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,809)         1:A:64:LEU:HD21         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,809)         1:A:64:LEU:HD23         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,809)         1:A:64:LEU:HD23         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,1520)         1:A:64:LEU:HD23         1:A:64:LEU:HB3         27         0.77           (1,1533)         1:A:9:GLU:HA         1:A:107:CYS:HA         12         0.77           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1	(1,809)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:64:LEU:HA	12	0.78
(1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE1         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         20         0.78           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         20         0.78           (1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         19         0.78           (1,809)         1:A:64:LEU:HD21         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,809)         1:A:64:LEU:HD22         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,809)         1:A:64:LEU:HD23         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,1520)         1:A:64:LEU:HD23         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,1533)         1:A:9:GLU:HA         1:A:13:LYS:HG3         27         0.77           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:107:CYS:HA         12         0.77           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         12         0.77           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3 <td< td=""><td>(1,274)</td><td>1:A:28:TYR:HA</td><td>1:A:31:LYS:HG3</td><td>24</td><td>0.78</td></td<>	(1,274)	1:A:28:TYR:HA	1:A:31:LYS:HG3	24	0.78
(1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE1         22         0.78           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:107:CYS:HA         20         0.78           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         20         0.78           (1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         19         0.78           (1,809)         1:A:64:LEU:HD21         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,809)         1:A:64:LEU:HD22         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,809)         1:A:64:LEU:HD23         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,274)         1:A:28:TYR:HA         1:A:31:LYS:HG3         27         0.77           (1,1530)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:107:CYS:HA         12         0.77           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         12         0.77           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         8         0.77           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         9         0.77           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3 <td< td=""><td>(1,1597)</td><td>1:A:53:LYS:HD2</td><td>1:A:14:TYR:HE1</td><td>22</td><td>0.78</td></td<>	(1,1597)	1:A:53:LYS:HD2	1:A:14:TYR:HE1	22	0.78
(1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         22         0.78           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:107:CYS:HA         20         0.78           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         20         0.78           (1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         19         0.78           (1,809)         1:A:64:LEU:HD21         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,809)         1:A:64:LEU:HD22         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,809)         1:A:64:LEU:HD23         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,274)         1:A:28:TYR:HA         1:A:31:LYS:HG3         27         0.77           (1,1533)         1:A:9:GLU:HA         1:A:10:GLN:HG3         20         0.77           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:107:CYS:HA         12         0.77           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         12         0.77           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         8         0.77           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         9         0.77           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1	(1,1597)	1:A:53:LYS:HD2	1:A:14:TYR:HE2	22	0.78
(1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:107:CYS:HA         20         0.78           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         20         0.78           (1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         19         0.78           (1,809)         1:A:64:LEU:HD21         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,809)         1:A:64:LEU:HD22         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,809)         1:A:64:LEU:HD23         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,274)         1:A:28:TYR:HA         1:A:31:LYS:HG3         27         0.77           (1,1533)         1:A:9:GLU:HA         1:A:12:GLN:HG2         20         0.77           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:107:CYS:HA         12         0.77           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         12         0.77           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         8         0.77           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         8         0.77           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         9         0.77           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1	(1,1597)	1:A:53:LYS:HD3	1:A:14:TYR:HE1	22	0.78
(1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         20         0.78           (1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         19         0.78           (1,809)         1:A:64:LEU:HD21         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,809)         1:A:64:LEU:HD22         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,809)         1:A:64:LEU:HD23         1:A:64:LEU:HA         29         0.77           (1,274)         1:A:28:TYR:HA         1:A:31:LYS:HG3         27         0.77           (1,1533)         1:A:9:GLU:HA         1:A:12:GLN:HG3         27         0.77           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:107:CYS:HA         12         0.77           (1,1520)         1:A:111:ASN:HD21         1:A:108:PHE:HA         12         0.77           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         8         0.77           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         8         0.77           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         9         0.77           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         9         0.77	(1,1597)	1:A:53:LYS:HD3	1:A:14:TYR:HE2	22	0.78
(1,1179)       1:A:61:GLU:HB3       1:A:58:ASP:HB3       19       0.78         (1,809)       1:A:64:LEU:HD21       1:A:64:LEU:HA       29       0.77         (1,809)       1:A:64:LEU:HD22       1:A:64:LEU:HA       29       0.77         (1,809)       1:A:64:LEU:HD23       1:A:64:LEU:HA       29       0.77         (1,274)       1:A:28:TYR:HA       1:A:31:LYS:HG3       27       0.77         (1,1533)       1:A:9:GLU:HA       1:A:12:GLN:HG2       20       0.77         (1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:107:CYS:HA       12       0.77         (1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:108:PHE:HA       12       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       8       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD23       8       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       9       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       9       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       9       0.77	(1,1520)	1:A:111:ASN:HD21	1:A:107:CYS:HA	20	0.78
(1,809)       1:A:64:LEU:HD21       1:A:64:LEU:HA       29       0.77         (1,809)       1:A:64:LEU:HD22       1:A:64:LEU:HA       29       0.77         (1,809)       1:A:64:LEU:HD23       1:A:64:LEU:HA       29       0.77         (1,274)       1:A:28:TYR:HA       1:A:31:LYS:HG3       27       0.77         (1,1533)       1:A:9:GLU:HA       1:A:12:GLN:HG2       20       0.77         (1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:107:CYS:HA       12       0.77         (1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:108:PHE:HA       12       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       8       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       8       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       9       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       9       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       9       0.77	(1,1520)	1:A:111:ASN:HD21	1:A:108:PHE:HA	20	0.78
(1,809)       1:A:64:LEU:HD22       1:A:64:LEU:HA       29       0.77         (1,809)       1:A:64:LEU:HD23       1:A:64:LEU:HA       29       0.77         (1,274)       1:A:28:TYR:HA       1:A:31:LYS:HG3       27       0.77         (1,1533)       1:A:9:GLU:HA       1:A:12:GLN:HG2       20       0.77         (1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:107:CYS:HA       12       0.77         (1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:108:PHE:HA       12       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       8       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD23       8       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       9       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       9       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       9       0.77	(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	19	0.78
(1,809)       1:A:64:LEU:HD23       1:A:64:LEU:HA       29       0.77         (1,274)       1:A:28:TYR:HA       1:A:31:LYS:HG3       27       0.77         (1,1533)       1:A:9:GLU:HA       1:A:12:GLN:HG2       20       0.77         (1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:107:CYS:HA       12       0.77         (1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:108:PHE:HA       12       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       8       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       8       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       9       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       9       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       9       0.77	(1,809)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:64:LEU:HA	29	0.77
(1,274)       1:A:28:TYR:HA       1:A:31:LYS:HG3       27       0.77         (1,1533)       1:A:9:GLU:HA       1:A:12:GLN:HG2       20       0.77         (1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:107:CYS:HA       12       0.77         (1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:108:PHE:HA       12       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       8       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       8       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD23       8       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       9       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       9       0.77	(1,809)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:64:LEU:HA	29	0.77
(1,1533)       1:A:9:GLU:HA       1:A:12:GLN:HG2       20       0.77         (1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:107:CYS:HA       12       0.77         (1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:108:PHE:HA       12       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       8       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       8       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD23       8       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       9       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       9       0.77	(1,809)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:64:LEU:HA	29	0.77
(1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:107:CYS:HA       12       0.77         (1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:108:PHE:HA       12       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       8       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       8       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD23       8       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       9       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       9       0.77	(1,274)	1:A:28:TYR:HA	1:A:31:LYS:HG3	27	0.77
(1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:107:CYS:HA       12       0.77         (1,1520)       1:A:111:ASN:HD21       1:A:108:PHE:HA       12       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       8       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       8       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD23       8       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       9       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       9       0.77	(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	20	0.77
(1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       8       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       8       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD23       8       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       9       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       9       0.77		1:A:111:ASN:HD21	1:A:107:CYS:HA	12	0.77
(1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       8       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD23       8       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       9       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       9       0.77	(1,1520)	1:A:111:ASN:HD21	1:A:108:PHE:HA	12	0.77
(1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD23       8       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       9       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       9       0.77	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	8	0.77
(1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       9       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       9       0.77	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	8	0.77
(1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       9       0.77         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       9       0.77	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	8	0.77
		1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	9	0.77
(1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD23 9 0.77	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	9	0.77
	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	9	0.77



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

(1,1443) 1:A:71:GLN				Violation (Å)
	:HG3	1:A:56:LEU:HD21	23	0.77
(1,1443) 1:A:71:GLN	:HG3	1:A:56:LEU:HD22	23	0.77
(1,1443) 1:A:71:GLN	:HG3	1:A:56:LEU:HD23	23	0.77
(1,1039) 1:A:5:VAL:1	HG11	1:A:71:GLN:HE21	9	0.77
(1,1039) 1:A:5:VAL:1	HG12	1:A:71:GLN:HE21	9	0.77
(1,1039) 1:A:5:VAL:1	HG13	1:A:71:GLN:HE21	9	0.77
(1,509) 1:A:91:LYS	:HB3	1:A:93:THR:HG21	7	0.76
(1,509) 1:A:91:LYS	:HB3	1:A:93:THR:HG22	7	0.76
(1,509) 1:A:91:LYS	:HB3	1:A:93:THR:HG23	7	0.76
(1,1533) 1:A:9:GLU	:HA	1:A:12:GLN:HG2	15	0.76
(1,1463) 1:A:38:PRO	:HD2	1:A:31:LYS:HD3	29	0.76
(1,1179) 1:A:61:GLU	:HB3	1:A:58:ASP:HB3	3	0.76
(1,809) 1:A:64:LEU:	HD21	1:A:64:LEU:HA	10	0.75
(1,809) 1:A:64:LEU:	HD22	1:A:64:LEU:HA	10	0.75
(1,809) 1:A:64:LEU:	HD23	1:A:64:LEU:HA	10	0.75
(1,590) 1:A:6:SER:	HB2	1:A:54:MET:HE1	22	0.75
(1,590) 1:A:6:SER:	HB2	1:A:54:MET:HE2	22	0.75
(1,590) 1:A:6:SER:	HB2	1:A:54:MET:HE3	22	0.75
(1,1483) 1:A:111:ASN	:HD22	1:A:110:LYS:HE2	18	0.75
(1,1483) 1:A:111:ASN	:HD22	1:A:110:LYS:HE3	18	0.75
(1,1443) 1:A:71:GLN	:HG3	1:A:56:LEU:HD21	5	0.75
(1,1443) 1:A:71:GLN	:HG3	1:A:56:LEU:HD22	5	0.75
(1,1443) 1:A:71:GLN	:HG3	1:A:56:LEU:HD23	5	0.75
(1,1039) 1:A:5:VAL:1	HG11	1:A:71:GLN:HE21	7	0.75
(1,1039) 1:A:5:VAL:1	HG12	1:A:71:GLN:HE21	7	0.75
(1,1039) 1:A:5:VAL:1	HG13	1:A:71:GLN:HE21	7	0.75
(1,463) 1:A:69:VA	L:H	1:A:69:VAL:HB	1	0.74
(1,1179) 1:A:61:GLU	:HB3	1:A:58:ASP:HB3	13	0.74
(1,590) 1:A:6:SER:	HB2	1:A:54:MET:HE1	10	0.73
(1,590) 1:A:6:SER:	HB2	1:A:54:MET:HE2	10	0.73
(1,590) 1:A:6:SER:	HB2	1:A:54:MET:HE3	10	0.73
(1,1483) 1:A:111:ASN	:HD22	1:A:110:LYS:HE2	19	0.73
(1,1483) 1:A:111:ASN	:HD22	1:A:110:LYS:HE3	19	0.73
(1,1443) 1:A:71:GLN	:HG3	1:A:56:LEU:HD21	15	0.73
(1,1443) 1:A:71:GLN	:HG3	1:A:56:LEU:HD22	15	0.73
(1,1443) 1:A:71:GLN	:HG3	1:A:56:LEU:HD23	15	0.73
(1,1443) 1:A:71:GLN	:HG3	1:A:56:LEU:HD21	20	0.73
(1,1443) 1:A:71:GLN	:HG3	1:A:56:LEU:HD22	20	0.73
(1,1443) 1:A:71:GLN	:HG3	1:A:56:LEU:HD23	20	0.73
(1,1179) 1:A:61:GLU	:HB3	1:A:58:ASP:HB3	2	0.73
(1,1179) 1:A:61:GLU	:HB3	1:A:58:ASP:HB3	5	0.73
(1,1179) 1:A:61:GLU	:HB3	1:A:58:ASP:HB3	18	0.73



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

(1,10) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:59:VAL:HG21 1 0.73 (1,10) 1:A:82:ARG:HG3 1:A:69:VAL:HG22 1 0.73 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 20 0.72 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 20 0.72 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 20 0.72 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 20 0.72 (1,295) 1:A:80:GLU:HA 1:A:80:GLU:HG3 3 0.72 (1,1483) 1:A:111:ASN:HD22 1:A:110:LYS:HE2 6 0.72 (1,1483) 1:A:111:ASN:HD22 1:A:110:LYS:HE3 6 0.72 (1,1483) 1:A:111:ASN:HD22 1:A:110:LYS:HE3 6 0.72 (1,147) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 15 0.72 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 17 0.71 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 17 0.71 (1,207) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE22 17 0.71 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 28 0.71 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:36:GLU:HB3 28 0.71 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:36:GLU:HD3 28 0.71 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD21 6 0.71 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD21 6 0.71 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 6 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG21 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG21 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG21 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG23 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG23 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG21 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG22 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG23 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG23 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG21 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG22 1 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG22 1 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG22 1 1 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG22 1 1 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG23 1 1 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG23 1 1 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG23 1 1 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG23 1 1	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,10) 1:A:82:ARG:HG3 1:A:69:VAL:HG22 1 0.73 (1,10) 1:A:82:ARG:HG3 1:A:69:VAL:HG23 1 0.73 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 20 0.72 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 20 0.72 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 20 0.72 (1,295) 1:A:80:GLU:HA 1:A:80:GLU:HG3 3 0.72 (1,483) 1:A:111:ASN:HD22 1:A:110:LYS:HE2 6 0.72 (1,1483) 1:A:111:ASN:HD22 1:A:110:LYS:HE2 6 0.72 (1,1483) 1:A:111:ASN:HD22 1:A:110:LYS:HE3 6 0.72 (1,147) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:54-ASP:HB3 15 0.72 (1,179) 1:A:6:GLU:HB3 1:A:51-ASP:HB3 15 0.72 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 17 0.71 (1,207) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE22 17 0.71 (1,207) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE22 17 0.71 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 28 0.71 (1,1587) 1:A:31:LYS:HA 1:A:36:GLU:HD21 6 0.71 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD21 6 0.71 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 6 0.71 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 6 0.71 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:56:LEU:HD23 6 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG21 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:7:THR:HG21 1 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG21 1 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG21 1 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG23 1 1 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG23 11 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG23 11 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG23 11 0.71 (1,	(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	30	0.73
(1,10)	(1,10)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:69:VAL:HG21	1	0.73
(1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 20 0.72 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 20 0.72 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 20 0.72 (1,295) 1:A:80:GLU:HA 1:A:80:GLU:HG3 3 0.72 (1,1483) 1:A:111:ASN:HD22 1:A:110:LYS:HE2 6 0.72 (1,1483) 1:A:111:ASN:HD22 1:A:110:LYS:HE3 6 0.72 (1,1483) 1:A:111:ASN:HD22 1:A:110:LYS:HE3 6 0.72 (1,1479) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 15 0.72 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 17 0.71 (1,207) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE22 17 0.71 (1,207) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE22 17 0.71 (1,207) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE22 17 0.71 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:71:GLN:HE22 17 0.71 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:71:GLN:HE22 17 0.71 (1,1587) 1:A:31:LYS:HA 1:A:36:GLU:HB3 28 0.71 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD21 6 0.71 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 6 0.71 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD23 6 0.71 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD23 6 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG21 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG21 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG21 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG22 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:7:THR:HG21 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:7:THR:HG21 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG22 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG22 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG22 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG23 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG23 1 1 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:T	(1,10)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:69:VAL:HG22	1	0.73
(1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 20 0.72 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 20 0.72 (1,509) 1:A:80:GLU:HA 1:A:80:GLU:HG3 3 0.72 (1,1483) 1:A:111:ASN:HD22 1:A:110:LYS:HE2 6 0.72 (1,1483) 1:A:111:ASN:HD22 1:A:110:LYS:HE3 6 0.72 (1,1483) 1:A:11:ASN:HD22 1:A:110:LYS:HE3 6 0.72 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 15 0.72 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 17 0.71 (1,207) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE22 17 0.71 (1,207) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE22 17 0.71 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 28 0.71 (1,1587) 1:A:31:LYS:HA 1:A:36:GLU:HB3 28 0.71 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD21 6 0.71 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 6 0.71 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 6 0.71 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 6 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG21 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG22 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG22 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG22 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:7:THR:HG22 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:7:THR:HG22 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:7:THR:HG21 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:7:THR:HG22 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG21 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG21 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG22 1 1 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG22 1 1 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A	(1,10)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:69:VAL:HG23	1	0.73
(1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 20 0.72 (1,295) 1:A:80:GLU:HA 1:A:80:GLU:HG3 3 0.72 (1,1483) 1:A:111:ASN:HD22 1:A:110:LYS:HE2 6 0.72 (1,1483) 1:A:111:ASN:HD22 1:A:10:LYS:HE3 6 0.72 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:71:GLN:HE32 17 0.71 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 17 0.71 (1,207) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE22 17 0.71 (1,207) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE22 17 0.71 (1,207) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE22 17 0.71 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:78:GLU:HB3 28 0.71 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:36:GLU:HB3 28 0.71 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD21 6 0.71 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 6 0.71 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 6 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:HR:HG21 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:HR:HG21 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:HR:HG22 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:HR:HG23 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:HR:HG23 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:HR:HG23 1 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:HR:HG23 1 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:HR:HG21 1 1 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:HR:HG21 11 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:HR:HG21 11 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:HR:HG21 11 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:HR:HG22 11 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:HR:HG23 11 0.	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	20	0.72
(1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         3         0.72           (1,1483)         1:A:111:ASN:HD22         1:A:110:LYS:HE2         6         0.72           (1,1483)         1:A:111:ASN:HD22         1:A:110:LYS:HE3         6         0.72           (1,179)         1:A:6:I:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         15         0.72           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         17         0.71           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         17         0.71           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         17         0.71           (1,207)         1:A:6:GLU:HB3         1:A:71:GLN:HE22         17         0.71           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         17         0.71           (1,207)         1:A:6:GLU:HB3         1:A:36:GLU:HB3         28         0.71           (1,143)         1:A:7:GLN:HG3         1:A:56:GLU:HD21         6         0.71           (1,1443)         1:A:7:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         6         0.71           (1,1443)         1:A:7:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         6         0.71           (1,1443)         1:A:7:GLN:HG3         1:A:56:LE	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	20	0.72
(1,1483) 1:A:111:ASN:HD22 1:A:110:LYS:HE2 6 0.72 (1,1483) 1:A:111:ASN:HD22 1:A:110:LYS:HE3 6 0.72 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 15 0.72 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 17 0.71 (1,207) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE22 17 0.71 (1,207) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE22 17 0.71 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 28 0.71 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:36:GLU:HB3 28 0.71 (1,1587) 1:A:31:LYS:HA 1:A:36:GLU:HB3 28 0.71 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD21 6 0.71 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 6 0.71 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 6 0.71 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD23 6 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG21 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG22 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG23 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG23 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:7:THR:HG23 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:7:THR:HG23 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG23 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG23 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG23 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG21 1 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG21 1 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG21 11 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG22 11 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG23 1	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	20	0.72
(1,1483) 1:A:111:ASN:HD22 1:A:110:LYS:HE3 6 0.72 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 15 0.72 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 17 0.71 (1,207) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE22 17 0.71 (1,207) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE22 17 0.71 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 28 0.71 (1,1587) 1:A:31:LYS:HA 1:A:36:GLU:HB3 28 0.71 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD21 6 0.71 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 6 0.71 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 6 0.71 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD23 6 0.71 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 26 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG21 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG22 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG23 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:7:THR:HG23 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:7:THR:HG23 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:7:THR:HG21 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG22 7 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG21 1 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG21 1 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG21 1 1 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG21 1 1 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG22 1 1 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG21 1 1 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG21 1 1 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG23 11 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG21 11 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG22 11 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG23 11 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:THR:HG23 11 0.71 (1,1112) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:7:	(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	3	0.72
(1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         15         0.72           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         17         0.71           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         17         0.71           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         17         0.71           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         28         0.71           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         28         0.71           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         6         0.71           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         6         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:	(1,1483)	1:A:111:ASN:HD22	1:A:110:LYS:HE2	6	0.72
(1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         17         0.71           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         17         0.71           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         17         0.71           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         17         0.71           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:36:GLU:HB3         28         0.71           (1,1443)         1:A:7:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         6         0.71           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         6         0.71           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         6         0.71           (1,1412)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7	(1,1483)	1:A:111:ASN:HD22	1:A:110:LYS:HE3	6	0.72
(1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         17         0.71           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         17         0.71           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         28         0.71           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         28         0.71           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         6         0.71           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         6         0.71           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:7:THR:HG21         7         0.71           (1,1112)         1:A:6:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG22         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:	(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	15	0.72
(1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         17         0.71           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         28         0.71           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         28         0.71           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         6         0.71           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         6         0.71           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         6         0.71           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         6         0.71           (1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:56:LEU:HD23         6         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG22         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG21         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:TH	(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	17	0.71
(1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         28         0.71           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         28         0.71           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         6         0.71           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         6         0.71           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         6         0.71           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         6         0.71           (1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         26         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG22         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG21         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR	(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	17	0.71
(1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         28         0.71           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         6         0.71           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         6         0.71           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         6         0.71           (1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         26         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG22         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG22         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG21         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:H	(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	17	0.71
(1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         6         0.71           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         6         0.71           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         6         0.71           (1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         26         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG22         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG22         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG23         1         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:H	(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	28	0.71
(1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         6         0.71           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         6         0.71           (1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         26         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG22         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG22         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:H	(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	28	0.71
(1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         6         0.71           (1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         26         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG22         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG21         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG22         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG23         1         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG22         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:H	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	6	0.71
(1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         26         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG22         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG22         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG21         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG22         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG23         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	6	0.71
(1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG22         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG21         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG22         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG22         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG21         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	6	0.71
(1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG22         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG21         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG22         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG21         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG21         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG22         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG23         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG22         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR	(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	26	0.71
(1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG21         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG22         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG21         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG22         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG23         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG21         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	7	0.71
(1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG21         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG22         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG21         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG23         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG21         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG22         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:TH	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	7	0.71
(1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG22         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG21         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG23         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG21         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG22         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG21         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         11         0.71           (1,11070)         1:A:7:THR:HG23         11 <td>(1,1112)</td> <td>1:A:5:VAL:HG11</td> <td>1:A:7:THR:HG23</td> <td>7</td> <td>0.71</td>	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	7	0.71
(1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG21         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG22         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG21         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         11         0.71           (1,1070)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         11         0.71           (1,1070)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	7	0.71
(1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG21         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         7         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG23         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG21         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG22         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:7:THR:HG23         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG21         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG22         11         0.71           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:7:THR:HG23         11         0.71           (1,1070)         1:A:7:HB:HB3         1:A:67:ASN:HA         19         0.71           (1,955)         1:A:51:PHE:H         1:A:50:VAL:HB         28         0.7           (1,274)         1:A:28:TYR:HA         1:A:31:LYS:HG3<	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	7	0.71
(1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG22       7       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG23       7       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG21       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG22       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG23       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:7:THR:HG21       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:7:THR:HG22       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG23       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG22       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG23       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG23       11       0.71         (1,1070)       1:A:7:THR:HG23       11       0.71         (1,955)       1:A:51:PHE:H       1:A:50:VAL:HB       28       0.7         (1,274)       1:A:28:TYR:HA       1:A:31:LYS:HG3       28       0.7	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	7	0.71
(1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG23       7       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG21       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG22       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG23       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:7:THR:HG21       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:7:THR:HG22       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG23       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG21       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG22       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG23       11       0.71         (1,1070)       1:A:7:HIS:HB3       1:A:67:ASN:HA       19       0.71         (1,955)       1:A:51:PHE:H       1:A:50:VAL:HB       28       0.7         (1,274)       1:A:28:TYR:HA       1:A:31:LYS:HG3       28       0.7	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	7	0.71
(1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG21       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG22       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG23       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:7:THR:HG21       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:7:THR:HG22       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG23       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG21       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG22       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG23       11       0.71         (1,1070)       1:A:70:HIS:HB3       1:A:67:ASN:HA       19       0.71         (1,955)       1:A:51:PHE:H       1:A:50:VAL:HB       28       0.7         (1,274)       1:A:28:TYR:HA       1:A:31:LYS:HG3       28       0.7	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	7	0.71
(1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG22       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG23       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:7:THR:HG21       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:7:THR:HG22       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:7:THR:HG23       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG21       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG22       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG23       11       0.71         (1,1070)       1:A:7:THR:HG3       1       0.71         (1,955)       1:A:7:THE:H       1:A:67:ASN:HA       19       0.71         (1,955)       1:A:51:PHE:H       1:A:50:VAL:HB       28       0.7         (1,274)       1:A:28:TYR:HA       1:A:31:LYS:HG3       28       0.7	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	7	0.71
(1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG23       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:7:THR:HG21       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:7:THR:HG22       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:7:THR:HG23       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG21       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG22       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG23       11       0.71         (1,1070)       1:A:70:HIS:HB3       1:A:67:ASN:HA       19       0.71         (1,955)       1:A:51:PHE:H       1:A:50:VAL:HB       28       0.7         (1,274)       1:A:28:TYR:HA       1:A:31:LYS:HG3       28       0.7	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	11	0.71
(1,1112)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:7:THR:HG21       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:7:THR:HG22       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:7:THR:HG23       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG21       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG22       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG23       11       0.71         (1,1070)       1:A:70:HIS:HB3       1:A:67:ASN:HA       19       0.71         (1,955)       1:A:51:PHE:H       1:A:50:VAL:HB       28       0.7         (1,274)       1:A:28:TYR:HA       1:A:31:LYS:HG3       28       0.7	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	11	0.71
(1,1112)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:7:THR:HG22       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:7:THR:HG23       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG21       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG22       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG23       11       0.71         (1,1070)       1:A:70:HIS:HB3       1:A:67:ASN:HA       19       0.71         (1,955)       1:A:51:PHE:H       1:A:50:VAL:HB       28       0.7         (1,274)       1:A:28:TYR:HA       1:A:31:LYS:HG3       28       0.7	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	11	0.71
(1,1112)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:7:THR:HG23       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG21       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG22       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG23       11       0.71         (1,1070)       1:A:70:HIS:HB3       1:A:67:ASN:HA       19       0.71         (1,955)       1:A:51:PHE:H       1:A:50:VAL:HB       28       0.7         (1,274)       1:A:28:TYR:HA       1:A:31:LYS:HG3       28       0.7	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	11	0.71
(1,1112)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:7:THR:HG23       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG21       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG22       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG23       11       0.71         (1,1070)       1:A:70:HIS:HB3       1:A:67:ASN:HA       19       0.71         (1,955)       1:A:51:PHE:H       1:A:50:VAL:HB       28       0.7         (1,274)       1:A:28:TYR:HA       1:A:31:LYS:HG3       28       0.7	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	11	0.71
(1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG22       11       0.71         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG23       11       0.71         (1,1070)       1:A:70:HIS:HB3       1:A:67:ASN:HA       19       0.71         (1,955)       1:A:51:PHE:H       1:A:50:VAL:HB       28       0.7         (1,274)       1:A:28:TYR:HA       1:A:31:LYS:HG3       28       0.7		1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	11	0.71
(1,1112)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:7:THR:HG23       11       0.71         (1,1070)       1:A:70:HIS:HB3       1:A:67:ASN:HA       19       0.71         (1,955)       1:A:51:PHE:H       1:A:50:VAL:HB       28       0.7         (1,274)       1:A:28:TYR:HA       1:A:31:LYS:HG3       28       0.7	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	11	0.71
(1,1070)       1:A:70:HIS:HB3       1:A:67:ASN:HA       19       0.71         (1,955)       1:A:51:PHE:H       1:A:50:VAL:HB       28       0.7         (1,274)       1:A:28:TYR:HA       1:A:31:LYS:HG3       28       0.7	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	11	0.71
(1,955)       1:A:51:PHE:H       1:A:50:VAL:HB       28       0.7         (1,274)       1:A:28:TYR:HA       1:A:31:LYS:HG3       28       0.7	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	11	0.71
(1,274) 1:A:28:TYR:HA 1:A:31:LYS:HG3 28 0.7	(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	19	0.71
	(1,955)	1:A:51:PHE:H	1:A:50:VAL:HB	28	0.7
	(1,274)	1:A:28:TYR:HA	1:A:31:LYS:HG3	28	0.7
	(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	26	0.7



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

(1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         26         0.7           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         26         0.7           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         19         0.7           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         19         0.7           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         19         0.7           (1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         4         0.7           (1,519)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:58:ASP:HB3         28         0.7           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         30         0.69           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         30         0.69           (1,250)         1:A:86:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         8         0.69           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         8         0.69           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         8         0.69           (1,207)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         1         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2<	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         19         0.7           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         19         0.7           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         19         0.7           (1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         4         0.7           (1,179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         28         0.7           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         30         0.69           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         30         0.69           (1,209)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         30         0.69           (1,209)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         30         0.69           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         8         0.69           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         8         0.69           (1,207)         1:A:5:AS:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE2         1         0.69           (1,1597)         1:A:5:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         1         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR	(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	26	0.7
(1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 19 0.7 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD23 19 0.7 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 4 0.7 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 4 0.7 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 28 0.7 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 30 0.69 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 30 0.69 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 30 0.69 (1,209) 1:A:51:VA:HB3 1:A:93:THR:HG23 30 0.69 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 8 0.69 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 8 0.69 (1,207) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE22 8 0.69 (1,207) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE22 8 0.69 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD2 1:A:14:TYR:HE1 1 0.69 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD2 1:A:14:TYR:HE1 1 0.69 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE1 1 0.69 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE2 1 0.69 (1,1597) 1:A:14:T3:LEU:HG 1:A:14:TYR:HE2 1 0.69 (1,1597) 1:A:14:T3:LEU:HG 1:A:14:TYR:HE2 1 0.69 (1,1597) 1:A:13:LEU:HG 1:A:11:CLYS:HE2 1 0.69 (1,1443) 1:A:11:ASN:HD22 1:A:110:LYS:HB2 20 0.68 (1,1443) 1:A:111:ASN:HD22 1:A:110:LYS:HB2 20 0.68 (1,1443) 1:A:111:ASN:HD22 1:A:110:LYS:HB2 14 0.68 (1,1443) 1:A:111:ASN:HD22 1:A:110:LYS:HB3 20 0.68 (1,1443) 1:A:111:ASN:HD22 1:A:110:LYS:HB3 14 0.68 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD21 24 0.68 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 24 0.68 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 24 0.68 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD23 24 0.68 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 24 0.66 (1,1509) 1:A:85:VAL:HB1 1:A:85:VAL:HB1 10 0.67 (1,1547) 1:A:31:LYS:HA 1:A:86:GLU:HB2 12 0.67 (1,1547) 1:A:50	(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	26	0.7
(1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD23 19 0.7 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 4 0.7 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 28 0.7 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 30 0.69 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 30 0.69 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 30 0.69 (1,295) 1:A:80:GLU:HA 1:A:80:GLU:HG3 8 0.69 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 8 0.69 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 8 0.69 (1,207) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE22 8 0.69 (1,207) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE22 8 0.69 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD2 1:A:14:TYR:HE1 1 0.69 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE1 1 0.69 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE1 1 0.69 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE2 1 0.69 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE2 1 0.69 (1,1597) 1:A:33:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE2 1 0.69 (1,1597) 1:A:13:LEU:HG 1:A:11:T:LYS:HE2 27 0.69 (1,1600) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB2 20 0.68 (1,960) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 20 0.68 (1,960) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 20 0.68 (1,1443) 1:A:111:ASN:HD22 1:A:110:LYS:HE2 14 0.68 (1,1443) 1:A:111:ASN:HD22 1:A:110:LYS:HE3 14 0.68 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD21 24 0.68 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD21 24 0.68 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 24 0.68 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 24 0.68 (1,1595) 1:A:85:VAL:H 1:A:85:VAL:H 18:85:VAL:H 18:85:VAL:H 18:0:GLU:HG3 21 0.67 (1,295) 1:A:80:GLU:HA 1:A:80:GLU:HG3 21 0.67 (1,1547) 1:A:36:GLU:HA 1:A:80:GLU:HG3 21 0.67 (1,1547) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:GLU:HB2 1:A:56:LEU:HD21 7 0.67 (1,1547) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:56:LEU:HD21 7 0.67 (1,1547) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:56:LEU:HD21 7 0.67 (1,1547) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:56:LEU:HD21 7 0.67 (1,1547) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:56:LEU:HD21 7 0.67 (1,1543) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:56:LEU:HD21 7 0.67 (1,1543) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:56:LEU:HD22 7 0.67 (1,1543) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:56:LEU:HD22 7 0.67 (1,1543) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:56:LEU:HD22 7 0.67 (1,11443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD21 7 0.67 (1,11443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 7 0.67 (1,1144	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	19	0.7
(1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         28         0.7           (1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:58:ASP:HB3         28         0.7           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         30         0.69           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         30         0.69           (1,509)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         8         0.69           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         8         0.69           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         8         0.69           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         8         0.69           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         8         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         1         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         1         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         1         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HB3         1:A:10:TCYS:HB2         27         0.69           (1,1597)         1:A:50:VAL:HB         1:A:10:CYS:HB2	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	19	0.7
(1,1179)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:93:THR:HG21         30         0.69           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         30         0.69           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         30         0.69           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         30         0.69           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         8         0.69           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         8         0.69           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         8         0.69           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         8         0.69           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         8         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE2         1         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE1         1         0.69           (1,1597)         1:A:13:GLU:HG         1:A:117:LYS:HE2         1         0.69           (1,1459)         1:A:10:GLY:HA3         1:A:10:CYS:HB3         20         0.68           (1,960)         1:A:10:GLY:HA3         1:A:10:LYS:H	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	19	0.7
(1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         30         0.69           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         30         0.69           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         30         0.69           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         8         0.69           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         8         0.69           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         8         0.69           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         8         0.69           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         8         0.69           (1,207)         1:A:5:S:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE2         1         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         1         0.69           (1,1597)         1:A:13:LEU:HG3         1:A:10:TYR:H	(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	4	0.7
(1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 30 0.69 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 30 0.69 (1,295) 1:A:80:GLU:HA 1:A:80:GLU:HG3 8 0.69 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 8 0.69 (1,207) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE22 8 0.69 (1,207) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE22 8 0.69 (1,207) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE22 8 0.69 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD2 1:A:14:TYR:HE1 1 0.69 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD2 1:A:14:TYR:HE2 1 0.69 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE1 1 0.69 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE2 1 0.69 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE2 1 0.69 (1,1597) 1:A:13:LEU:HG 1:A:117:LYS:HE2 27 0.69 (1,960) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 20 0.68 (1,960) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 20 0.68 (1,1483) 1:A:111:ASN:HD22 1:A:110:LYS:HE2 14 0.68 (1,1483) 1:A:111:ASN:HD22 1:A:110:LYS:HE2 14 0.68 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD21 24 0.68 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD21 24 0.68 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 24 0.68 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD23 24 0.68 (1,1595) 1:A:80:GLU:HA 1:A:80:GLU:HB2 10 0.67 (1,295) 1:A:80:GLU:HA 1:A:80:GLU:HG3 9 0.67 (1,295) 1:A:80:GLU:HA 1:A:80:GLU:HG3 21 0.67 (1,1547) 1:A:31:LYS:HA 1:A:36:GLU:HB2 12 0.67 (1,1547) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:38:PRO:HD2 17 0.67 (1,1547) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:38:PRO:HD2 17 0.67 (1,1547) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:LEU:HD21 7 0.67 (1,1543) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD21 7 0.67 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 7 0.67 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 7 0.67 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD23 7 0.67 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 7 0.67 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 7 0.67 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD22 7 0.67 (1,1443) 1:A:71:GLN:HG3 1:A:56:LEU:HD	(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	28	0.7
(1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         30         0.69           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         8         0.69           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         8         0.69           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         8         0.69           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         8         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         1         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         1         0.69           (1,1597)         1:A:13:LEU:HG         1:A:117:LYS:HE2         27         0.69           (1,1483)         1:A:114:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB2         20         0.68           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB2         20         0.68           (1,1483)         1:A:111:ASN:HD22         1:A:110:	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	30	0.69
(1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         8         0.69           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         8         0.69           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         8         0.69           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HE22         8         0.69           (1,1597)         1:A:5:SLYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         1         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         1         0.69           (1,1597)         1:A:13:LEU:HG         1:A:10:TYR:HE2         27         0.69           (1,960)         1:A:113:LEU:HG         1:A:10:TYS:HB3         20         0.68           (1,443)         1:A:111:ASN:HD22         1:A:110:LYS:HE2<	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	30	0.69
(1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         8         0.69           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         8         0.69           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         8         0.69           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HE1         1         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         1         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE1         1         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         1         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         1         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         1         0.69           (1,1597)         1:A:13:LEU:HG         1:A:117:LYS:HE2         2         0.69           (1,1597)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB2         20         0.68           (1,1490)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         20         0.68           (1,960)         1:A:111:ASN:HD22         1:A:110:LYS:HE2         14         0.68           (1,1483)         1:A:111:ASN:HD22         1:A:1	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	30	0.69
(1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         8         0.69           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         8         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         1         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         1         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:11:TYR:HE2         1         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:11:TYR:HE2         1         0.69           (1,1597)         1:A:6:13:LYS:HD3         1:A:11:LYS:HE2         2         0.69           (1,1450)         1:A:11:LYS:HB3         1:A:10:LYS:HB2         20         0.68           (1,1443)         1:A:11:LASN:HD22         1:A:110:LYS:HB3         14         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         24         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56	(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	8	0.69
(1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         8         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         1         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE2         1         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         1         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         1         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         1         0.69           (1,1597)         1:A:13:LEU:HG         1:A:117:LYS:HE2         27         0.69           (1,1590)         1:A:10:LEU:HG         1:A:10:LYS:HE2         20         0.68           (1,960)         1:A:10:GGLY:HA3         1:A:10:LYS:HB3         20         0.68           (1,960)         1:A:11:ASN:HD22         1:A:110:LYS:HB3         20         0.68           (1,1443)         1:A:111:ASN:HD22         1:A:110:LYS:HB3         14         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         9         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         24         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:	(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	8	0.69
(1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         1         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE2         1         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE1         1         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         1         0.69           (1,1597)         1:A:13:LEU:HG         1:A:117:LYS:HE2         27         0.69           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB2         20         0.68           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         20         0.68           (1,960)         1:A:111:ASN:HD22         1:A:110:LYS:HE2         14         0.68           (1,143)         1:A:111:ASN:HD22         1:A:110:LYS:HE3         14         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         24         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3	(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	8	0.69
(1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE2         1         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE1         1         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         1         0.69           (1,1597)         1:A:13:LEU:HG         1:A:117:LYS:HE2         27         0.69           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB2         20         0.68           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         20         0.68           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:110:LYS:HE2         14         0.68           (1,1483)         1:A:111:ASN:HD22         1:A:110:LYS:HE3         14         0.68           (1,1483)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         9         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         24         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         24         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         24         0.68           (1,1595)         1:A:80:GLU:HA         1:A:85:VAL:HB         18         0.67           (1,295)         1:A:80:GLU:HA	(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	8	0.69
(1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE1         1         0.69           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         1         0.69           (1,1159)         1:A:113:LEU:HG         1:A:117:LYS:HE2         27         0.69           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         20         0.68           (1,960)         1:A:111:ASN:HD22         1:A:110:LYS:HE2         14         0.68           (1,1483)         1:A:111:ASN:HD22         1:A:110:LYS:HE3         14         0.68           (1,1443)         1:A:111:ASN:HD22         1:A:110:LYS:HE3         14         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:59:ASN:HD22         9         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         24         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         24         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         24         0.68           (1,955)         1:A:80:GLU:HA3         1:A:80:GLU:HB3         18         0.67           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         9         0.67           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         <	(1,1597)	1:A:53:LYS:HD2	1:A:14:TYR:HE1	1	0.69
(1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         1         0.69           (1,1159)         1:A:113:LEU:HG         1:A:117:LYS:HE2         27         0.69           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB2         20         0.68           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         20         0.68           (1,1483)         1:A:111:ASN:HD22         1:A:110:LYS:HE2         14         0.68           (1,1483)         1:A:111:ASN:HD22         1:A:110:LYS:HE3         14         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:59:ASN:HD22         9         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         24         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         24         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         24         0.68           (1,955)         1:A:51:PHE:H         1:A:50:VAL:HB         18         0.67           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         9         0.67           (1,295)         1:A:80:GLU:HB2         1:A:38:PC:HD2         12         0.67           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2	(1,1597)	1:A:53:LYS:HD2	1:A:14:TYR:HE2	1	0.69
(1,1159)         1:A:113:LEU:HG         1:A:117:LYS:HE2         27         0.69           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB2         20         0.68           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         20         0.68           (1,1483)         1:A:111:ASN:HD22         1:A:110:LYS:HE2         14         0.68           (1,1483)         1:A:111:ASN:HD22         1:A:110:LYS:HE3         14         0.68           (1,1483)         1:A:111:ASN:HD22         1:A:110:LYS:HE3         14         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         9         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         24         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         24         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         24         0.68           (1,1443)         1:A:51:PHE:H         1:A:50:VAL:HB         18         0.67           (1,639)         1:A:80:GLU:HA         1:A:85:VAL:HB         10         0.67           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         9         0.67           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2	(1,1597)	1:A:53:LYS:HD3	1:A:14:TYR:HE1	1	0.69
(1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB2         20         0.68           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         20         0.68           (1,1483)         1:A:111:ASN:HD22         1:A:110:LYS:HE2         14         0.68           (1,1483)         1:A:111:ASN:HD22         1:A:110:LYS:HE3         14         0.68           (1,1483)         1:A:111:ASN:HD22         1:A:10:LYS:HE3         14         0.68           (1,1443)         1:A:95:ASN:HA         1:A:92:ASN:HD22         9         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         24         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         24         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         24         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         24         0.68           (1,1555)         1:A:51:PHE:H         1:A:50:VAL:HB         18         0.67           (1,639)         1:A:80:GLU:HA         1:A:85:VAL:HB         10         0.67           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         21         0.67           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         <	(1,1597)	1:A:53:LYS:HD3	1:A:14:TYR:HE2	1	0.69
(1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         20         0.68           (1,1483)         1:A:111:ASN:HD22         1:A:110:LYS:HE2         14         0.68           (1,1483)         1:A:111:ASN:HD22         1:A:110:LYS:HE3         14         0.68           (1,1443)         1:A:95:ASN:HA         1:A:92:ASN:HD22         9         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         24         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         24         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         24         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         24         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         24         0.68           (1,955)         1:A:51:PHE:H         1:A:50:VAL:HB         18         0.67           (1,639)         1:A:85:VAL:H         1:A:88:GLU:HB3         10         0.67           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         21         0.67           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:38:PRO:HD2         12         0.67           (1,1547)         1:A:31:LYS:HA         1	(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	27	0.69
(1,1483)         1:A:111:ASN:HD22         1:A:110:LYS:HE2         14         0.68           (1,1483)         1:A:111:ASN:HD22         1:A:110:LYS:HE3         14         0.68           (1,145)         1:A:95:ASN:HA         1:A:92:ASN:HD22         9         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         24         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         24         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         24         0.68           (1,955)         1:A:51:PHE:H         1:A:50:VAL:HB         18         0.67           (1,639)         1:A:85:VAL:H         1:A:85:VAL:HB         10         0.67           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         9         0.67           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         21         0.67           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:38:PRO:HD2         12         0.67           (1,1547)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB2         12         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         28         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG3         1:A:56:L	(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	20	0.68
(1,1483)         1:A:111:ASN:HD22         1:A:110:LYS:HE3         14         0.68           (1,145)         1:A:95:ASN:HA         1:A:92:ASN:HD22         9         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         24         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         24         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         24         0.68           (1,955)         1:A:51:PHE:H         1:A:50:VAL:HB         18         0.67           (1,639)         1:A:85:VAL:H         1:A:85:VAL:HB         10         0.67           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         9         0.67           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         21         0.67           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:38:PRO:HD2         12         0.67           (1,1547)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB2         12         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         28         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:54:MET:HG3         28         0.67           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU	(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	20	0.68
(1,145)         1:A:95:ASN:HA         1:A:92:ASN:HD22         9         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         24         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         24         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         24         0.68           (1,955)         1:A:51:PHE:H         1:A:50:VAL:HB         18         0.67           (1,639)         1:A:85:VAL:H         1:A:85:VAL:HB         10         0.67           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         9         0.67           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         21         0.67           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:38:PRO:HD2         12         0.67           (1,1547)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB2         12         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         28         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:54:MET:HG3         28         0.67           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         7         0.67           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD	(1,1483)	1:A:111:ASN:HD22	1:A:110:LYS:HE2	14	0.68
(1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       24       0.68         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       24       0.68         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD23       24       0.68         (1,955)       1:A:51:PHE:H       1:A:50:VAL:HB       18       0.67         (1,639)       1:A:85:VAL:H       1:A:85:VAL:HB       10       0.67         (1,295)       1:A:80:GLU:HA       1:A:80:GLU:HG3       9       0.67         (1,295)       1:A:80:GLU:HA       1:A:80:GLU:HG3       21       0.67         (1,1547)       1:A:36:GLU:HB2       1:A:38:PRO:HD2       12       0.67         (1,1547)       1:A:31:LYS:HA       1:A:36:GLU:HB2       12       0.67         (1,1509)       1:A:50:VAL:HG11       1:A:54:MET:HG3       28       0.67         (1,1509)       1:A:50:VAL:HG13       1:A:54:MET:HG3       28       0.67         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       7       0.67         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       7       0.67         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG21       26       0.67         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11	(1,1483)	1:A:111:ASN:HD22	1:A:110:LYS:HE3	14	0.68
(1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         24         0.68           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         24         0.68           (1,955)         1:A:51:PHE:H         1:A:50:VAL:HB         18         0.67           (1,639)         1:A:85:VAL:H         1:A:85:VAL:HB         10         0.67           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         9         0.67           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         21         0.67           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         12         0.67           (1,1547)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB2         12         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         28         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:54:MET:HG3         28         0.67           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         7         0.67           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         7         0.67           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         26         0.67           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG22         26	(1,145)	1:A:95:ASN:HA	1:A:92:ASN:HD22	9	0.68
(1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         24         0.68           (1,955)         1:A:51:PHE:H         1:A:50:VAL:HB         18         0.67           (1,639)         1:A:85:VAL:H         1:A:85:VAL:HB         10         0.67           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         9         0.67           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         21         0.67           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:38:PRO:HD2         12         0.67           (1,1547)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB2         12         0.67           (1,1547)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB2         12         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         28         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:54:MET:HG3         28         0.67           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         7         0.67           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         7         0.67           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         26         0.67           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG22	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	24	0.68
(1,955)         1:A:51:PHE:H         1:A:50:VAL:HB         18         0.67           (1,639)         1:A:85:VAL:H         1:A:85:VAL:HB         10         0.67           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         9         0.67           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         21         0.67           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:38:PRO:HD2         12         0.67           (1,1547)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB2         12         0.67           (1,1547)         1:A:31:LYS:HA         1:A:54:MET:HG3         28         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         28         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:56:LEU:HD3         28         0.67           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         7         0.67           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         7         0.67           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         26         0.67           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG22         26         0.67	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	24	0.68
(1,639)         1:A:85:VAL:H         1:A:85:VAL:HB         10         0.67           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         9         0.67           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         21         0.67           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         12         0.67           (1,1547)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB2         12         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         28         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:54:MET:HG3         28         0.67           (1,1509)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:54:MET:HG3         28         0.67           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD21         7         0.67           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD22         7         0.67           (1,1443)         1:A:71:GLN:HG3         1:A:56:LEU:HD23         7         0.67           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG21         26         0.67           (1,1112)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:7:THR:HG22         26         0.67	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	24	0.68
(1,295)       1:A:80:GLU:HA       1:A:80:GLU:HG3       9       0.67         (1,295)       1:A:80:GLU:HA       1:A:80:GLU:HG3       21       0.67         (1,1547)       1:A:36:GLU:HB2       1:A:38:PRO:HD2       12       0.67         (1,1547)       1:A:31:LYS:HA       1:A:36:GLU:HB2       12       0.67         (1,1509)       1:A:50:VAL:HG11       1:A:54:MET:HG3       28       0.67         (1,1509)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:54:MET:HG3       28       0.67         (1,1509)       1:A:50:VAL:HG13       1:A:54:MET:HG3       28       0.67         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       7       0.67         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       7       0.67         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD23       7       0.67         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG21       26       0.67         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG22       26       0.67	(1,955)	1:A:51:PHE:H	1:A:50:VAL:HB	18	0.67
(1,295)       1:A:80:GLU:HA       1:A:80:GLU:HG3       21       0.67         (1,1547)       1:A:36:GLU:HB2       1:A:38:PRO:HD2       12       0.67         (1,1547)       1:A:31:LYS:HA       1:A:36:GLU:HB2       12       0.67         (1,1509)       1:A:50:VAL:HG11       1:A:54:MET:HG3       28       0.67         (1,1509)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:54:MET:HG3       28       0.67         (1,1509)       1:A:50:VAL:HG13       1:A:54:MET:HG3       28       0.67         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       7       0.67         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       7       0.67         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD23       7       0.67         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG21       26       0.67         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG22       26       0.67	(1,639)	1:A:85:VAL:H	1:A:85:VAL:HB	10	0.67
(1,1547)       1:A:36:GLU:HB2       1:A:38:PRO:HD2       12       0.67         (1,1547)       1:A:31:LYS:HA       1:A:36:GLU:HB2       12       0.67         (1,1509)       1:A:50:VAL:HG11       1:A:54:MET:HG3       28       0.67         (1,1509)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:54:MET:HG3       28       0.67         (1,1509)       1:A:50:VAL:HG13       1:A:54:MET:HG3       28       0.67         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       7       0.67         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       7       0.67         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD23       7       0.67         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG21       26       0.67         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG22       26       0.67	(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	9	0.67
(1,1547)       1:A:31:LYS:HA       1:A:36:GLU:HB2       12       0.67         (1,1509)       1:A:50:VAL:HG11       1:A:54:MET:HG3       28       0.67         (1,1509)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:54:MET:HG3       28       0.67         (1,1509)       1:A:50:VAL:HG13       1:A:54:MET:HG3       28       0.67         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       7       0.67         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       7       0.67         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD23       7       0.67         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG21       26       0.67         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG22       26       0.67	(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	21	0.67
(1,1509)       1:A:50:VAL:HG11       1:A:54:MET:HG3       28       0.67         (1,1509)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:54:MET:HG3       28       0.67         (1,1509)       1:A:50:VAL:HG13       1:A:54:MET:HG3       28       0.67         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       7       0.67         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       7       0.67         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD23       7       0.67         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG21       26       0.67         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG22       26       0.67	(1,1547)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:38:PRO:HD2	12	0.67
(1,1509)       1:A:50:VAL:HG12       1:A:54:MET:HG3       28       0.67         (1,1509)       1:A:50:VAL:HG13       1:A:54:MET:HG3       28       0.67         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       7       0.67         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       7       0.67         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD23       7       0.67         (1,1443)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG21       26       0.67         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG22       26       0.67         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG22       26       0.67	(1,1547)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB2	12	0.67
(1,1509)       1:A:50:VAL:HG13       1:A:54:MET:HG3       28       0.67         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       7       0.67         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       7       0.67         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD23       7       0.67         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG21       26       0.67         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG22       26       0.67	(1,1509)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:54:MET:HG3	28	0.67
(1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD21       7       0.67         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       7       0.67         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD23       7       0.67         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG21       26       0.67         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG22       26       0.67	(1,1509)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:54:MET:HG3	28	0.67
(1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD22       7       0.67         (1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD23       7       0.67         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG21       26       0.67         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG22       26       0.67	(1,1509)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:54:MET:HG3	28	0.67
(1,1443)       1:A:71:GLN:HG3       1:A:56:LEU:HD23       7       0.67         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG21       26       0.67         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG22       26       0.67	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	7	0.67
(1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG21       26       0.67         (1,1112)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:7:THR:HG22       26       0.67	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	7	0.67
(1,1112) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:7:THR:HG22 26 0.67	(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	7	0.67
	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	26	0.67
(1 1112) $1 \cdot \Delta \cdot 5 \cdot \text{VAI} \cdot \text{HC11}$ $1 \cdot \Delta \cdot 7 \cdot \text{THR} \cdot \text{HC22}$ 26 0.67	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	26	0.67
(1,1112) $1.6.9.76.11611$ $1.6.1.11110.11629$ $20$ $0.01$	(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	26	0.67



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	26	0.67
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	26	0.67
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	26	0.67
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	26	0.67
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	26	0.67
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	26	0.67
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	27	0.66
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	27	0.66
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	27	0.66
(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	26	0.65
(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	27	0.65
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	5	0.65
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	5	0.65
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	5	0.65
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	4	0.64
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	4	0.64
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	4	0.64
(1,478)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:46:TYR:HE1	18	0.64
(1,478)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:46:TYR:HE2	18	0.64
(1,478)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:46:TYR:HE1	18	0.64
(1,478)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:46:TYR:HE2	18	0.64
(1,478)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:46:TYR:HE1	18	0.64
(1,478)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:46:TYR:HE2	18	0.64
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	12	0.64
(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	5	0.63
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	2	0.62
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	2	0.62
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	2	0.62
(1,321)	1:A:30:GLU:HG2	1:A:30:GLU:H	9	0.62
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	2	0.62
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	2	0.62
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	2	0.62
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	22	0.61
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	22	0.61
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	22	0.61
(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	23	0.61
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	22	0.61
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	13	0.61
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	13	0.61
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	13	0.61
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB2	7	0.61
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB3	7	0.61



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB2	7	0.61
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB3	7	0.61
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB2	7	0.61
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB3	7	0.61
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	19	0.61
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	19	0.61
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	19	0.61
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	14	0.6
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	14	0.6
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	28	0.6
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	28	0.6
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	2	0.6
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	2	0.6
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	2	0.6
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	28	0.6
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	28	0.6
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	28	0.6
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	12	0.6
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	20	0.6
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	26	0.6
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	26	0.6
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	3	0.6
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	7	0.6
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	4	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	4	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	4	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	5	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	5	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	5	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	6	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	6	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	6	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	7	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	7	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	7	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	8	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	8	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	8	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	9	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	9	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	9	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	10	0.59
( //			1	d on mort mage



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	10	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	10	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	11	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	11	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	11	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	13	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	13	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	13	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	14	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	14	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	14	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	15	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	15	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	15	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	16	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	16	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	16	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	18	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	18	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	18	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	19	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	19	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	19	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	20	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	20	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	20	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	21	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	21	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	21	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	22	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	22	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	22	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	23	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	23	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	23	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	24	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	24	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	24	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	25	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	25	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	25	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	26	0.59



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	26	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	26	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	27	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	27	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	27	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	29	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	29	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	29	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	30	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	30	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	30	0.59
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	5	0.59
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	5	0.59
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	5	0.59
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	11	0.59
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	15	0.59
(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	15	0.59
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	29	0.59
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	29	0.59
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	27	0.59
(1,886)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:H	21	0.58
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	11	0.58
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	1	0.58
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	1	0.58
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	1	0.58
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	3	0.58
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	3	0.58
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	3	0.58
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	12	0.58
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	12	0.58
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	12	0.58
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	17	0.58
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	17	0.58
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	17	0.58
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	6	0.58
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	6	0.58
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	6	0.58
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	1	0.58
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	6	0.58
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	8	0.58
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	13	0.58
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	16	0.58



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

(1,436)		$\mathbf{Atom-2}$	Model	Violation (Å)
	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	17	0.58
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	19	0.58
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	11	0.58
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	11	0.58
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	11	0.58
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	12	0.58
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	12	0.58
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	12	0.58
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	19	0.58
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	13	0.58
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	19	0.58
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	19	0.58
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	19	0.58
(1,886)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:H	13	0.57
(1,886)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:H	16	0.57
(1,886)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:H	27	0.57
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	26	0.57
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	2	0.57
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	3	0.57
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	4	0.57
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	7	0.57
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	9	0.57
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	10	0.57
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	14	0.57
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	22	0.57
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	24	0.57
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	25	0.57
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	26	0.57
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	28	0.57
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	26	0.57
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	26	0.57
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	26	0.57
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	16	0.57
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	16	0.57
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	16	0.57
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	5	0.56
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	5	0.56
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	1	0.56
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	18	0.56
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	23	0.56
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	27	0.56
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	30	0.56



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

(1,295) 1:A:80:GLU:HA 1:A:80:GLU:HG3 15 0.56 (1,274) 1:A:28:TYR:HA 1:A:31:JYS:HG3 26 0.56 (1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 10 0.56 (1,1179) 1:A:70:HIS:HB3 1:A:58:ASP:HB3 10 0.56 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE21 1 0.56 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE21 1 0.56 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE21 1 0.56 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE21 1 0.56 (1,960) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB2 19 0.55 (1,960) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 19 0.55 (1,960) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 19 0.55 (1,960) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 26 0.55 (1,509) 1:A:11:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 16 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 16 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 16 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 19 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 19 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 19 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 19 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 19 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 14 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 19 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 19 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 19 0.55 (1,509) 1:A:9	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1179) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:58:ASP:HB3 10 0.56 (1,1070) 1:A:70:HIS:HB3 1:A:67:ASN:HA 4 0.56 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE21 1 0.56 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE21 1 0.56 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE21 1 0.56 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE21 1 0.56 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE21 1 0.56 (1,960) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB2 19 0.55 (1,960) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 19 0.55 (1,960) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 26 0.55 (1,960) 1:A:101:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 26 0.55 (1,960) 1:A:101:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 26 0.55 (1,960) 1:A:11:X:S:HB3 1:A:33:TYS:H 4 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 16 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 16 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 16 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 19 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 19 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 19 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 19 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 19 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 19 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 19 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG24 19 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:91:LYS:HB2 19 0.54 (1,60) 1:A:104:GLY:HA	(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	15	0.56
(1,1070)	(1,274)	1:A:28:TYR:HA	1:A:31:LYS:HG3	26	0.56
(1,1039) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE21 1 0.56 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE21 1 0.56 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE21 1 0.56 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE21 1 0.56 (1,1039) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB2 19 0.55 (1,1040) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 26 0.55 (1,1040) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 26 0.55 (1,1040) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 26 0.55 (1,1041) 1:A:12:ASP:HB3 1:A:105:ASP:H 18 0.55 (1,1041) 1:A:12:ASP:HB3 1:A:12:LYS:HB3 5 0.55 (1,1041) 1:A:12:CASN:HB2 1:A:12:LYS:HB 4 0.55 (1,1041) 1:A:12:CASN:HB2 1:A:13:LYS:HB 4 0.55 (1,1041) 1:A:11:LYS:HB3 1:	(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	10	0.56
(1,1039)	(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	4	0.56
(1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         1         0.56           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB2         19         0.55           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         19         0.55           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB2         26         0.55           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         26         0.55           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         26         0.55           (1,960)         1:A:166:ASP:HB3         1:A:66:ASP:H         18         0.55           (1,806)         1:A:123:ASP:H         1:A:66:ASP:H         18         0.55           (1,601)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:TYS:H         4         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         16         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         19         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         19         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         19         0.55           (1,509)         1:A:96:LYS:HB3         1:A:93:T	(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	1	0.56
(1,960) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB2 19 0.55 (1,960) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 19 0.55 (1,960) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB2 26 0.55 (1,960) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 26 0.55 (1,866) 1:A:66:ASP:HB3 1:A:66:ASP:H 18 0.55 (1,866) 1:A:123:ASP:H 1:A:122:LYS:HA 5 0.55 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 4 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 16 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 16 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 16 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 16 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 19 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 19 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 19 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 19 0.55 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 30 0.55 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 30 0.55 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 14 0.55 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 14 0.55 (1,1597) 1:A:5:SLYS:HD2 1:A:14:TYR:HE1 4 0.55 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD2 1:A:14:TYR:HE1 4 0.55 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD2 1:A:14:TYR:HE1 4 0.55 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE2 4 0.55 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE2 4 0.55 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE2 4 0.55 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE2 4 0.55 (1,1600) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 9 0.54 (1,160) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 7 0.54 (1,760) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 7 0.54 (1,760) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 7 0.54 (1,760) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 7 0.54 (1,760) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 7 0.54 (1,760) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 7 0.54 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 8 0.54	(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	1	0.56
(1,960) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 19 0.55 (1,960) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB2 26 0.55 (1,960) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 26 0.55 (1,886) 1:A:66:ASP:HB3 1:A:66:ASP:H 18 0.55 (1,886) 1:A:66:ASP:HB3 1:A:66:ASP:H 18 0.55 (1,606) 1:A:123:ASP:H 1:A:122:LYS:HA 5 0.55 (1,601) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 16 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 16 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 16 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 16 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 16 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 19 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 19 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 16 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 19 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 10 0.55 (1,303) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 30 0.55 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 14 0.55 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 14 0.55 (1,207) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE22 14 0.55 (1,207) 1:A:5:XJL:HG13 1:A:71:GLN:HE22 14 0.55 (1,1507) 1:A:53:LYS:HD2 1:A:14:TYR:HE1 4 0.55 (1,1507) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE1 4 0.55 (1,1070) 1:A:70:HIS:HB3 1:A:67:ASN:HA 2 0.55 (1,1070) 1:A:70:HIS:HB3 1:A:67:ASN:HA 2 0.55 (1,1070) 1:A:70:HIS:HB3 1:A:14:TYR:HE2 4 0.55 (1,1070) 1:A:70:HIS:HB3 1:A:17:LYS:HE2 7 0.54 (1,760) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 7 0.54 (1,760) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 7 0.54 (1,760) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 7 0.54 (1,760) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 7 0.54 (1,760) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 7 0.54 (1,760) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 7 0.54 (1,760) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 7 0.54 (1,760) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS	(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	1	0.56
(1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB2         26         0.55           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         26         0.55           (1,886)         1:A:66:ASP:HB3         1:A:66:ASP:H         18         0.55           (1,806)         1:A:123:ASP:H         1:A:66:ASP:H         5         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:53:LYS:H         4         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         16         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         16         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         19         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         19         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         19         0.55           (1,390)         1:A:93:LYS:HB3         1:A:193:THR:H	(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	19	0.55
(1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         26         0.55           (1,886)         1:A:66:ASP:HB3         1:A:66:ASP:H         18         0.55           (1,806)         1:A:123:ASP:H         1:A:62:ASN:HB2         1:A:53:LYS:H         4         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         16         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         16         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         19         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         19         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         19         0.55           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         30         0.55           (1,393)         1:A:63:PRO:	(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	19	0.55
(1,886)         1:A:66:ASP:HB3         1:A:66:ASP:H         18         0.55           (1,806)         1:A:123:ASP:H         1:A:122:LYS:HA         5         0.55           (1,641)         1:A:52:ASN:HB2         1:A:53:LYS:H         4         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         16         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         16         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         19         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         19         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         19         0.55           (1,303)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         30         0.55           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2	(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	26	0.55
(1,806)         1:A:123:ASP:H         1:A:52:LYS:HA         5         0.55           (1,641)         1:A:52:ASN:HB2         1:A:53:LYS:H         4         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         16         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         16         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         16         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         19         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         19         0.55           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         30         0.55           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         30         0.55           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,207)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE	(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	26	0.55
(1,641)         1:A:52:ASN:HB2         1:A:53:LYS:H         4         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         16         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         16         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         16         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         19         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         19         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         19         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         19         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         19         0.55           (1,436)         1:A:12:GLN:HB3         5         0.55           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         30         0.55           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         30         0.55           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,207)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         4	(1,886)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:H	18	0.55
(1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         16         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         16         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         16         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         19         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         19         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         19         0.55           (1,436)         1:A:12:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         19         0.55           (1,436)         1:A:691:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         19         0.55           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         30         0.55           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,207)         1:A:55:VAL:HG11         1:	(1,806)	1:A:123:ASP:H	1:A:122:LYS:HA	5	0.55
(1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 16 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 16 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 19 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 19 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 19 0.55 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 19 0.55 (1,436) 1:A:12:GLN:H 1:A:12:GLN:HB3 5 0.55 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 30 0.55 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD2 30 0.55 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 14 0.55 (1,207) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE22 14 0.55 (1,207) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE22 14 0.55 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD2 1:A:14:TYR:HE1 4 0.55 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD2 1:A:14:TYR:HE1 4 0.55 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE1 4 0.55 (1,1070) 1:A:70:HIS:HB3 1:A:67:ASN:HA 2 0.55 (1,1070) 1:A:70:HIS:HB3 1:A:67:ASN:HA 2 0.55 (1,1070) 1:A:70:HIS:HB3 1:A:67:ASN:HA 2 0.55 (1,160) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 9 0.54 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 7 0.54 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 7 0.54 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 7 0.54 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 7 0.54	(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	4	0.55
(1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         16         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         19         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         19         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         19         0.55           (1,436)         1:A:12:GLN:H         1:A:12:GLN:HB3         5         0.55           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         30         0.55           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         30         0.55           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         30         0.55           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         30         0.55           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,207)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         4         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         4         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HB3         1:A:67:ASN:HA	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	16	0.55
(1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         19         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         19         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         19         0.55           (1,436)         1:A:12:GLN:H         1:A:67:PHE:HD1         30         0.55           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         30         0.55           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,207)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         4         0.55           (1,207)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE2         4         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         4         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         4         0.55           (1,1070)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         2         0.55           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	16	0.55
(1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         19         0.55           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         19         0.55           (1,436)         1:A:12:GLN:H         1:A:12:GLN:HB3         5         0.55           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         30         0.55           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         30         0.55           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,207)         1:A:5:S:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,207)         1:A:5:S:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,1597)         1:A:5:S:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE24         4         0.55           (1,1597)         1:A:5:S:LYS:HD3         1:	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	16	0.55
(1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         19         0.55           (1,436)         1:A:12:GLN:H         1:A:12:GLN:HB3         5         0.55           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         30         0.55           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         30         0.55           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         4         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         4         0.55           (1,1597)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         2         0.55           (1,1070)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:H	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	19	0.55
(1,436)         1:A:12:GLN:H         1:A:12:GLN:HB3         5         0.55           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         30         0.55           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         30         0.55           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         4         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         4         0.55           (1,1597)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         2         0.55           (1,1070)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         2         0.55           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	19	0.55
(1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         30         0.55           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         30         0.55           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,207)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE2         14         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE2         4         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         4         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         4         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         4         0.55           (1,1597)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         2         0.55           (1,1070)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         2         0.55           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB2         9         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:H	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	19	0.55
(1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         30         0.55           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         4         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         4         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE1         4         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         4         0.55           (1,1597)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         2         0.55           (1,1070)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         2         0.55           (1,1070)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         28         0.55           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB2         9         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         7         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:	(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	5	0.55
(1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         4         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         4         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         4         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:67:ASN:HA         2         0.55           (1,1070)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         2         0.55           (1,1070)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         28         0.55           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB2         9         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         7         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         7         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD11         1:A:117:LY	(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	30	0.55
(1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         4         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         4         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE1         4         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         4         0.55           (1,1070)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         2         0.55           (1,1070)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         28         0.55           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB2         9         0.54           (1,960)         1:A:13:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         7         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD22         1:A:117:LYS:HE2         7         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         7         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD12         1:A:117:LYS:HE2         7         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:L	(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	30	0.55
(1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         14         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         4         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE2         4         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE1         4         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         4         0.55           (1,1070)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         2         0.55           (1,1070)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         28         0.55           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB2         9         0.54           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         9         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         7         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         7         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD11         1:A:117:LYS:HE2         7         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD12         1:A:117:LYS:HE2         7         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:L	(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	14	0.55
(1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         4         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE2         4         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE1         4         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         4         0.55           (1,1070)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         2         0.55           (1,1070)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         28         0.55           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB2         9         0.54           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         9         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         7         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         7         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD11         1:A:117:LYS:HE2         7         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD12         1:A:117:LYS:HE2         7         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         7         0.54           (1,76)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:	(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	14	0.55
(1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE2         4         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE1         4         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         4         0.55           (1,1070)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         2         0.55           (1,1070)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         28         0.55           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB2         9         0.54           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         9         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         7         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         7         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD11         1:A:117:LYS:HE2         7         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD12         1:A:117:LYS:HE2         7         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         7         0.54           (1,76)         1:A:193:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         8         0.54	(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	14	0.55
(1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE1         4         0.55           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         4         0.55           (1,1070)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         2         0.55           (1,1070)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         28         0.55           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB2         9         0.54           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         9         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         7         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD22         1:A:117:LYS:HE2         7         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         7         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD12         1:A:117:LYS:HE2         7         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         7         0.54           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         7         0.54           (1,76)         1:A:19:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         8         0.54	(1,1597)	1:A:53:LYS:HD2	1:A:14:TYR:HE1	4	0.55
(1,1597)       1:A:53:LYS:HD3       1:A:14:TYR:HE2       4       0.55         (1,1070)       1:A:70:HIS:HB3       1:A:67:ASN:HA       2       0.55         (1,1070)       1:A:70:HIS:HB3       1:A:67:ASN:HA       28       0.55         (1,960)       1:A:104:GLY:HA3       1:A:107:CYS:HB2       9       0.54         (1,960)       1:A:104:GLY:HA3       1:A:107:CYS:HB3       9       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD12       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD12       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG21       8       0.54	(1,1597)	1:A:53:LYS:HD2	1:A:14:TYR:HE2	4	0.55
(1,1070)       1:A:70:HIS:HB3       1:A:67:ASN:HA       2       0.55         (1,1070)       1:A:70:HIS:HB3       1:A:67:ASN:HA       28       0.55         (1,960)       1:A:104:GLY:HA3       1:A:107:CYS:HB2       9       0.54         (1,960)       1:A:104:GLY:HA3       1:A:107:CYS:HB3       9       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD12       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG21       8       0.54	(1,1597)	1:A:53:LYS:HD3	1:A:14:TYR:HE1	4	0.55
(1,1070)       1:A:70:HIS:HB3       1:A:67:ASN:HA       28       0.55         (1,960)       1:A:104:GLY:HA3       1:A:107:CYS:HB2       9       0.54         (1,960)       1:A:104:GLY:HA3       1:A:107:CYS:HB3       9       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD12       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD12       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG21       8       0.54	(1,1597)	1:A:53:LYS:HD3	1:A:14:TYR:HE2	4	0.55
(1,960)       1:A:104:GLY:HA3       1:A:107:CYS:HB2       9       0.54         (1,960)       1:A:104:GLY:HA3       1:A:107:CYS:HB3       9       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD11       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD12       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG21       8       0.54	(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	2	0.55
(1,960)       1:A:104:GLY:HA3       1:A:107:CYS:HB3       9       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD11       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD12       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG21       8       0.54	(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	28	0.55
(1,76)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD11       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD12       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG21       8       0.54	(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	9	0.54
(1,76)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD11       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD12       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG21       8       0.54	(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	9	0.54
(1,76)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD11       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD12       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG21       8       0.54	· ' /	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	7	0.54
(1,76)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD11       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD12       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG21       8       0.54		1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	7	0.54
(1,76)       1:A:113:LEU:HD11       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD12       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG21       8       0.54	(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	7	0.54
(1,76)       1:A:113:LEU:HD12       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG21       8       0.54		1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	7	0.54
(1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:117:LYS:HE2       7       0.54         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG21       8       0.54	. ,	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	7	0.54
(1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 8 0.54		1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	7	0.54
	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	8	0.54
$\frac{1}{1}$ (1,000)   1.11.01.11.00   1.11.00.11110.11022   0   0.04	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	8	0.54



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	8	0.54
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	1	0.54
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	1	0.54
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	28	0.54
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	28	0.54
(1,321)	1:A:30:GLU:HG2	1:A:30:GLU:H	19	0.54
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	23	0.54
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	23	0.54
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	23	0.54
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	27	0.54
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	27	0.54
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	27	0.54
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	30	0.54
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	30	0.54
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	1	0.54
(1,1447)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HA	4	0.54
(1,1447)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HA	4	0.54
(1,1447)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HA	4	0.54
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	27	0.53
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	27	0.53
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	2	0.53
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	26	0.53
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	26	0.53
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	26	0.53
(1,1509)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:54:MET:HG3	18	0.53
(1,1509)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:54:MET:HG3	18	0.53
(1,1509)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:54:MET:HG3	18	0.53
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	27	0.53
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	29	0.53
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	6	0.52
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	6	0.52
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	7	0.52
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	7	0.52
(1,590)	1:A:6:SER:HB2	1:A:54:MET:HE1	3	0.52
(1,590)	1:A:6:SER:HB2	1:A:54:MET:HE2	3	0.52
(1,590)	1:A:6:SER:HB2	1:A:54:MET:HE3	3	0.52
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	24	0.52
(1,1478)	1:A:9:GLU:HA	1:A:8:THR:HG21	20	0.52
(1,1478)	1:A:9:GLU:HA	1:A:8:THR:HG22	20	0.52
(1,1478)	1:A:9:GLU:HA	1:A:8:THR:HG23	20	0.52
(1,1228)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:LYS:HB2	23	0.52
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	10	0.52



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	15	0.52
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	2	0.52
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE1	3	0.52
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE2	3	0.52
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE3	3	0.52
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE1	10	0.52
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE2	10	0.52
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE3	10	0.52
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE1	22	0.52
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE2	22	0.52
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE3	22	0.52
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	12	0.51
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	12	0.51
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	12	0.51
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	12	0.51
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	12	0.51
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	12	0.51
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	13	0.51
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	22	0.51
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	14	0.51
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	14	0.51
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	14	0.51
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	7	0.51
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	7	0.51
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	22	0.51
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	22	0.51
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	22	0.51
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	2	0.51
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	6	0.51
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE1	2	0.51
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE2	2	0.51
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE3	2	0.51
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	3	0.5
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	3	0.5
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	8	0.5
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	8	0.5
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	13	0.5
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	13	0.5
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	21	0.5
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	21	0.5
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	28	0.5
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	28	0.5
			Continue	



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

(1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 28 0.5 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 28 0.5 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 28 0.5 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 28 0.5 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 12 0.5 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 12 0.5 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 27 0.5 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 25 0.5 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 25 0.5 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 25 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE1 1:A:11:LEU:HD11 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE1 1:A:11:LEU:HD12 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE1 1:A:11:LEU:HD12 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE2 1:A:11:LEU:HD13 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE2 1:A:11:LEU:HD13 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE2 1:A:11:LEU:HD12 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE2 1:A:11:LEU:HD13 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE2 1:A:11:LEU:HD13 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE3 1:A:11:LEU:HD11 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE3 1:A:11:LEU:HD13 11 0.5 (1,1368) 1:A:13:ARG:HA 1:A:13:ARG:HA 23 0.5 (1,1010) 1:A:54:MET:HE3 1:A:11:LEU:HD13 11 0.5 (1,1368) 1:A:13:ARG:HA 1:A:13:ARG:HB 20 0.5 (1,1010) 1:A:54:MET:HG2 1:A:54:MET:HE3 20 0.5 (1,1010) 1:A:54:MET:HG2 1:A:54:MET:HE3 20 0.5 (1,1010) 1:A:54:MET:HG2 1:A:54:MET:HE3 20 0.5 (1,010) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 10 0.49 (1,60) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 10 0.49 (1,60) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 26 0.49 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 26 0.49 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 26 0.4	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 28 0.5 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 28 0.5 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 12 0.5 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 12 0.5 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 27 0.5 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 25 0.5 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 25 0.5 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 25 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE1 1:A:11:LEU:HD11 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE1 1:A:11:LEU:HD11 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE1 1:A:11:LEU:HD12 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE2 1:A:11:LEU:HD13 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE2 1:A:11:LEU:HD11 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE2 1:A:11:LEU:HD11 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE2 1:A:11:LEU:HD13 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE3 1:A:11:LEU:HD13 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE3 1:A:11:LEU:HD13 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE3 1:A:11:LEU:HD11 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE3 1:A:11:LEU:HD11 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE3 1:A:11:LEU:HD11 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE3 1:A:11:LEU:HD13 11 0.5 (1,1368) 1:A:13:ARG:HA 1:A:13:ARG:HG3 8 0.5 (1,1010) 1:A:54:MET:HG2 1:A:54:MET:HE1 20 0.5 (1,1010) 1:A:54:MET:HG2 1:A:54:MET:HE2 20 0.5 (1,1010) 1:A:54:MET:HG2 1:A:54:MET:HE2 20 0.5 (1,1010) 1:A:54:MET:HG2 1:A:54:MET:HE2 20 0.5 (1,1010) 1:A:54:MET:HG2 1:A:54:MET:HE3 20 0.5 (1,000) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 10 0.49 (1,600) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 10 0.49 (1,601) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 7 0.49 (1,601) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 26 0.49 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 26 0.49 (1,601) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 26 0.49 (1,601) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 26 0	(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	28	0.5
(1,76)	(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	28	0.5
(1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 12 0.5 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 27 0.5 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 25 0.5 (1,1393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 25 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE1 1:A:11:LEU:HD11 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE1 1:A:11:LEU:HD12 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE1 1:A:11:LEU:HD13 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE2 1:A:11:LEU:HD11 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE2 1:A:11:LEU:HD11 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE2 1:A:11:LEU:HD13 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE3 1:A:11:LEU:HD12 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE3 1:A:11:LEU:HD13 11 0.5 (1,1307) 1:A:54:MET:HE3 1:A:11:LEU:HD14 11 0.5 (1,1307) 1:A:70:HIS:HB3 1:A:67:ASN:HA 23 0.5 (1,1010) 1:A:70:HIS:HB3 1:A:67:ASN:HA 23 0.5 (1,1010) 1:A:54:MET:HG2 1:A:54:MET:HE2 20 0.5 (1,1010) 1:A:54:MET:HG2 1:A:54:MET:HE2 20 0.5 (1,1010) 1:A:54:MET:HG2 1:A:54:MET:HE3 20 0.5 (1,1010) 1:A:54:MET:HG2 1:A:54:MET:HE3 20 0.5 (1,960) 1:A:104:GIY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 10 0.49 (1,960) 1:A:104:GIY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 10 0.49 (1,960) 1:A:104:GIY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 10 0.49 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 26 0.49 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 26 0.49 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 26 0.49 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 26 0.49 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 26 0.49 (1,76) 1:A:113:LEU:HD14 1:A:117:LYS:HE2 26 0.49 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 3 0.49 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 15 0.49 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 15 0.49 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 15 0.49 (1,641) 1:A:52:ASN:HB	(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	28	0.5
(1,641)         1:A:52:ASN:HB2         1:A:53:LYS:H         27         0.5           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         25         0.5           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         25         0.5           (1,367)         1:A:54:MET;HE1         1:A:11:LEU:HD12         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET;HE1         1:A:11:LEU:HD13         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET;HE2         1:A:11:LEU:HD13         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET;HE2         1:A:11:LEU:HD12         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET;HE2         1:A:11:LEU:HD12         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET;HE2         1:A:11:LEU:HD13         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET;HE3         1:A:11:LEU:HD13         11         0.5           (1,1360)         1:A:54:MET;HE3         1:A:11:LEU:	(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	28	0.5
(1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 25 0.5 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD2 25 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE1 1:A:11:LEU:HD11 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE1 1:A:11:LEU:HD12 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE1 1:A:11:LEU:HD13 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE2 1:A:11:LEU:HD11 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE2 1:A:11:LEU:HD11 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE2 1:A:11:LEU:HD12 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE3 1:A:11:LEU:HD13 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE3 1:A:11:LEU:HD13 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE3 1:A:11:LEU:HD13 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE3 1:A:11:LEU:HD11 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE3 1:A:11:LEU:HD12 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE3 1:A:11:LEU:HD12 11 0.5 (1,1368) 1:A:13:ARG:HA 1:A:13:ARG:HG3 8 0.5 (1,100) 1:A:70:HIS:HB3 1:A:67:ASN:HA 23 0.5 (1,1010) 1:A:54:MET:HG2 1:A:54:MET:HE1 20 0.5 (1,1010) 1:A:54:MET:HG2 1:A:54:MET:HE2 20 0.5 (1,1010) 1:A:54:MET:HG2 1:A:54:MET:HE3 20 0.5 (1,1010) 1:A:54:MET:HG2 1:A:54:MET:HE3 20 0.5 (1,100) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 10 0.49 (1,960) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 10 0.49 (1,960) 1:A:13:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 26 0.49 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 26 0.49 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 26 0.49 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 26 0.49 (1,76) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 26 0.49 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 3 0.49 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 3 0.49 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 4 0.49 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 15 0.49 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 3 0.49 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 3 0.49 (1,640) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 13 0.49 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 13 0.49 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 13 0.49	(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	12	0.5
(1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD2 25 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE1 1:A:11:LEU:HD11 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE1 1:A:11:LEU:HD12 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE1 1:A:11:LEU:HD13 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE2 1:A:11:LEU:HD13 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE2 1:A:11:LEU:HD11 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE2 1:A:11:LEU:HD11 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE2 1:A:11:LEU:HD12 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE3 1:A:11:LEU:HD13 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE3 1:A:11:LEU:HD13 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE3 1:A:11:LEU:HD13 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE3 1:A:11:LEU:HD11 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE3 1:A:11:LEU:HD12 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE3 1:A:11:LEU:HD12 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE3 1:A:11:LEU:HD13 11 0.5 (1,1367) 1:A:54:MET:HE3 1:A:11:LEU:HD13 11 0.5 (1,1010) 1:A:54:MET:HE3 1:A:13:ARG:HG3 8 0.5 (1,1070) 1:A:70:HIS:HB3 1:A:67:ASN:HA 23 0.5 (1,1010) 1:A:54:MET:HG2 1:A:54:MET:HE1 20 0.5 (1,1010) 1:A:54:MET:HG2 1:A:54:MET:HE2 20 0.5 (1,1010) 1:A:54:MET:HG2 1:A:54:MET:HE3 20 0.5 (1,060) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB2 10 0.49 (1,960) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB2 10 0.49 (1,960) 1:A:104:GLY:HA3 1:A:107:CYS:HB3 10 0.49 (1,920) 1:A:62:GLY:HA2 1:A:63:PRO:HD2 18 0.49 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 26 0.49 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 26 0.49 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 26 0.49 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 26 0.49 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 26 0.49 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 3 0.49 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 3 0.49 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 4 0.49 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 5 0.49 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 15 0.49 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 16 0.49 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 30 0.49 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 13 0.49 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3	(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	27	0.5
(1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD11         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD12         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD13         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD11         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD12         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD12         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD12         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD12         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:61:LEU:HD13         11         0.5           (1,1360)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         23         0.5           (1,100)         1:A:54:MET:HG2         1:A:5	(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	25	0.5
(1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD12         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD13         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD11         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD12         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD11         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD12         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         11         0.5           (1,1367)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         23         0.5           (1,1000)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         23         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE2         20         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE3         20         0.5           (1,960)         1:A:104:GIY:HA3         1:A:107:	(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	25	0.5
(1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD13         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD11         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD12         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD13         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD11         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         11         0.5           (1,1308)         1:A:13:ARG:HA         1:A:3:13:ARG:HG3         8         0.5           (1,1308)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         23         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE2         20         0.5           (1,1010)         1:A:62:MET:HG2         1:A:54:MET:HE3         20         0.5           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107	(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD11	11	0.5
(1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD11         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD12         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD13         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD11         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:67:ASN:HA         23         0.5           (1,1070)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         23         0.5           (1,1070)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:54:MET:HE1         20         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE2         20         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE3         20         0.5           (1,1010)         1:A:104:GIY:HA3         1:A:107:CYS:HB2         10         0.49           (1,960)         1:A:104:GIY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         10         0.49           (1,960)         1:A:13:LEU:HD12         1:A:17	(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD12	11	0.5
(1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD12         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD13         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD11         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD12         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         11         0.5           (1,1308)         1:A:13:ARG:HA         1:A:31:ARG:HG3         8         0.5           (1,1070)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         23         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE1         20         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE2         20         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE3         20         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE3         20         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE3         20         0.5           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         10         0.49           (1,960)         1:A:62:GLY:HA3         1:A:117:LYS:	(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD13	11	0.5
(1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD13         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD11         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD12         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         11         0.5           (1,1308)         1:A:13:ARG:HA         1:A:13:ARG:HG3         8         0.5           (1,1070)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         23         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE1         20         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE3         20         0.5           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         10         0.49           (1,960)         1:A:62:GLY:HA3         1:A:117:LYS:H	(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD11	11	0.5
(1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD11         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD12         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         11         0.5           (1,1308)         1:A:13:ARG:HA         1:A:3:13:ARG:HG3         8         0.5           (1,1070)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         23         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE1         20         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE3         20         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE3         20         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE3         20         0.5           (1,1010)         1:A:64:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB2         10         0.49           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         10         0.49           (1,960)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         18         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:13:LEU:HD13         1:A:117:	(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD12	11	0.5
(1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD11         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD12         11         0.5           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         11         0.5           (1,1308)         1:A:13:ARG:HA         1:A:3:13:ARG:HG3         8         0.5           (1,1070)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         23         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE1         20         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE3         20         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE3         20         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE3         20         0.5           (1,1010)         1:A:64:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB2         10         0.49           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         10         0.49           (1,960)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         18         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:13:LEU:HD13         1:A:117:	(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD13	11	0.5
(1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         11         0.5           (1,1308)         1:A:13:ARG:HA         1:A:13:ARG:HG3         8         0.5           (1,1070)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         23         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE1         20         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE2         20         0.5           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB2         10         0.49           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         10         0.49           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         10         0.49           (1,960)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         18         0.49           (1,920)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         18         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD11         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:13:LEU:HD13         1:A:17	(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD11	11	0.5
(1,1308)         1:A:13:ARG:HA         1:A:13:ARG:HG3         8         0.5           (1,1070)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         23         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE1         20         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE2         20         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE3         20         0.5           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB2         10         0.49           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         10         0.49           (1,960)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         18         0.49           (1,760)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD11         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:13:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:53:HS         1:A:53:LYS:		1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD12	11	0.5
(1,1308)         1:A:13:ARG:HA         1:A:13:ARG:HG3         8         0.5           (1,1070)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:67:ASN:HA         23         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE1         20         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE2         20         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE3         20         0.5           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB2         10         0.49           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         10         0.49           (1,960)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         18         0.49           (1,760)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD11         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:13:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:53:HS         1:A:53:LYS:	(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD13	11	0.5
(1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE1         20         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE2         20         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE3         20         0.5           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB2         10         0.49           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         10         0.49           (1,960)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         18         0.49           (1,760)         1:A:13:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD22         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:13:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:13:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:13:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,641)         1:A:52:ASN:HB2         1		1:A:13:ARG:HA	1:A:13:ARG:HG3	8	0.5
(1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE2         20         0.5           (1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE3         20         0.5           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB2         10         0.49           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         10         0.49           (1,920)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         18         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD22         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,641)         1:A:52:ASN:HB2         1:A:53:LYS:H         3         0.49           (1,641)         1:A:52:ASN:HB2         1:A:53:LYS:H         7         0.49           (1,641)         1:A:52:ASN:HB2         1:A:53	(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	23	0.5
(1,1010)         1:A:54:MET:HG2         1:A:54:MET:HE3         20         0.5           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB2         10         0.49           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         10         0.49           (1,920)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         18         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD22         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD12         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:13:LEU:HD13         1:A:517:LYS:HE2         26         0.49           (1,641)         1:A:52:ASN:HB2         1:A:53:LYS:H         3         0.49           (1,641)         1:A:52:ASN:HB2         1:A:53:LYS:H         7         0.49           (1,641)         1:A:52:ASN:HB2         1:A:5	(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE1	20	0.5
(1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB2         10         0.49           (1,960)         1:A:104:GLY:HA3         1:A:107:CYS:HB3         10         0.49           (1,920)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         18         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD22         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD11         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD12         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,76)         1:A:13:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         26         0.49           (1,641)         1:A:52:ASN:HB2         1:A:53:LYS:H         3         0.49           (1,641)         1:A:52:ASN:HB2         1:A:53:LYS:H         7         0.49           (1,641)         1:A:52:ASN:HB2         1:A:53:LYS:H         16         0.49           (1,641)         1:A:52:ASN:HB2         1:A:53:	(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE2	20	0.5
(1,960)       1:A:104:GLY:HA3       1:A:107:CYS:HB3       10       0.49         (1,920)       1:A:62:GLY:HA2       1:A:63:PRO:HD2       18       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD11       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD12       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:5117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:5117:LYS:HE2       26       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       3       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       7       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       16       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       30       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2	(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE3	20	0.5
(1,920)       1:A:62:GLY:HA2       1:A:63:PRO:HD2       18       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD11       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD12       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:5117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:517:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       3       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       7       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       16       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       30       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3	(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	10	0.49
(1,76)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD11       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD12       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       3       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       7       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       15       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       16       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       24       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       30       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG21       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1	(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	10	0.49
(1,76)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD11       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD12       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       3       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       7       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       16       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       24       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       30       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG21       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG23       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3 <t< td=""><td>(1,920)</td><td>1:A:62:GLY:HA2</td><td>1:A:63:PRO:HD2</td><td>18</td><td>0.49</td></t<>	(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	18	0.49
(1,76)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD11       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD12       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       3       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       7       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       8       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       15       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       16       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       24       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       30       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG21       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG23       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG23       13       0.49	(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	26	0.49
(1,76)       1:A:113:LEU:HD11       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD12       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       3       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       7       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       8       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       15       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       16       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       24       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       30       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG21       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG22       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG23       13       0.49	(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	26	0.49
(1,76)       1:A:113:LEU:HD12       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       3       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       7       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       8       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       15       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       16       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       24       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       30       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG21       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG22       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG23       13       0.49	(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	26	0.49
(1,76)       1:A:113:LEU:HD13       1:A:117:LYS:HE2       26       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       3       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       7       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       8       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       15       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       16       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       24       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       30       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG21       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG23       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG23       13       0.49	(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	26	0.49
(1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       3       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       7       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       8       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       15       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       16       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       24       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       30       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG21       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG22       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG23       13       0.49	(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	26	0.49
(1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       7       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       8       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       15       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       16       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       24       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       30       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG21       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG22       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG23       13       0.49	(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	26	0.49
(1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       8       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       15       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       16       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       24       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       30       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG21       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG22       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG23       13       0.49	(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	3	0.49
(1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       8       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       15       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       16       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       24       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       30       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG21       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG22       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG23       13       0.49	· · /	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	7	0.49
(1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       15       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       16       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       24       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       30       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG21       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG22       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG23       13       0.49	· · · /	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	8	0.49
(1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       24       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       30       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG21       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG22       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG23       13       0.49		1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	15	0.49
(1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       24       0.49         (1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       30       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG21       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG22       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG23       13       0.49	(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	16	0.49
(1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       30       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG21       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG22       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG23       13       0.49	· · /	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	24	0.49
(1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG21       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG22       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG23       13       0.49	(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	30	0.49
(1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG22       13       0.49         (1,509)       1:A:91:LYS:HB3       1:A:93:THR:HG23       13       0.49	/	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	13	0.49
	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	13	0.49
(1.303) 1·A·63·PRO·HD2 1·A·57·PHE·HD1 0 0.40	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	13	0.49
$(1,000)$   1.11.00.1110.11102   1.11.01.1111111   $\theta$   0.49	(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	9	0.49



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	9	0.49
(1,321)	1:A:30:GLU:HG2	1:A:30:GLU:H	22	0.49
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	19	0.49
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	19	0.49
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	19	0.49
(1,194)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:6:SER:HB2	20	0.49
(1,194)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:6:SER:HB2	20	0.49
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD2	1:A:14:TYR:HE1	10	0.49
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD2	1:A:14:TYR:HE2	10	0.49
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD3	1:A:14:TYR:HE1	10	0.49
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD3	1:A:14:TYR:HE2	10	0.49
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	20	0.49
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	20	0.49
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB2	8	0.49
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB3	8	0.49
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB2	8	0.49
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB3	8	0.49
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB2	8	0.49
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB3	8	0.49
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	24	0.49
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	4	0.48
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	4	0.48
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	11	0.48
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	11	0.48
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	18	0.48
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	18	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	2	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	4	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	7	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	8	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	10	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	11	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	12	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	14	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	18	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	19	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	20	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	21	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	24	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	28	0.48
	1.11.00.11 100.1112.0			
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	30	0.48



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	6	0.48
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	17	0.48
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	18	0.48
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	18	0.48
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	1	0.48
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	2	0.48
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	8	0.48
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	17	0.48
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	17	0.48
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	11	0.48
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	27	0.48
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	4	0.48
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	4	0.48
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	4	0.48
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	3	0.48
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	8	0.48
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	20	0.48
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	25	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	3	0.47
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	5	0.47
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	6	0.47
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	9	0.47
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	13	0.47
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	15	0.47
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	16	0.47
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	17	0.47
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	22	0.47
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	23	0.47
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	25	0.47
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	26	0.47
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	27	0.47
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	29	0.47
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	19	0.47
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	9	0.47
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	10	0.47
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	29	0.47
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	5	0.47
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	8	0.47
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	25	0.47
(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	29	0.47
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	13	0.47
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	13	0.47



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	13	0.47
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	18	0.47
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	18	0.47
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	18	0.47
(1,1228)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:LYS:HB2	1	0.47
(1,1171)	1:A:50:VAL:HB	1:A:50:VAL:H	18	0.47
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	16	0.46
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	16	0.46
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	30	0.46
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	30	0.46
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	5	0.46
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	5	0.46
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	5	0.46
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	5	0.46
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	5	0.46
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	5	0.46
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	12	0.46
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	12	0.46
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	12	0.46
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	12	0.46
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	12	0.46
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	12	0.46
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	6	0.46
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	6	0.46
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	6	0.46
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	6	0.46
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	6	0.46
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	6	0.46
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	11	0.46
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	11	0.46
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	11	0.46
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	11	0.46
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	11	0.46
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	11	0.46
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	14	0.46
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	6	0.46
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	6	0.46
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	22	0.46
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	22	0.46
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	3	0.46
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	4	0.46
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	15	0.46
			1	d on nort nago



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	19	0.46
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	23	0.46
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	27	0.46
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	12	0.46
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	12	0.46
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	12	0.46
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	3	0.46
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	3	0.46
(1,1547)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:38:PRO:HD2	27	0.46
(1,1547)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB2	27	0.46
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	6	0.46
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	13	0.46
(1,1520)	1:A:111:ASN:HD21	1:A:107:CYS:HA	13	0.46
(1,1520)	1:A:111:ASN:HD21	1:A:108:PHE:HA	13	0.46
(1,1440)	1:A:84:GLU:HA	1:A:87:LYS:HD2	25	0.46
(1,1440)	1:A:84:GLU:HA	1:A:87:LYS:HD3	25	0.46
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	6	0.46
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	5	0.46
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	9	0.46
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	25	0.45
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	25	0.45
(1,925)	1:A:55:GLN:HA	1:A:55:GLN:HG3	5	0.45
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	3	0.45
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	25	0.45
(1,901)	1:A:69:VAL:H	1:A:69:VAL:HG21	1	0.45
(1,901)	1:A:69:VAL:H	1:A:69:VAL:HG22	1	0.45
(1,901)	1:A:69:VAL:H	1:A:69:VAL:HG23	1	0.45
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	14	0.45
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	14	0.45
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	14	0.45
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	14	0.45
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	14	0.45
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	14	0.45
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	20	0.45
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	3	0.45
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	3	0.45
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	3	0.45
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	6	0.45
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	7	0.45
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	9	0.45
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	10	0.45
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	20	0.45



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	21	0.45
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	24	0.45
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	26	0.45
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	29	0.45
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	15	0.45
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	15	0.45
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	15	0.45
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	19	0.45
(1,1447)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HA	25	0.45
(1,1447)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HA	25	0.45
(1,1447)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HA	25	0.45
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	28	0.45
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	28	0.45
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	28	0.45
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB2	29	0.45
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB3	29	0.45
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB2	29	0.45
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB3	29	0.45
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB2	29	0.45
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB3	29	0.45
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	26	0.45
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	15	0.44
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	15	0.44
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	23	0.44
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	23	0.44
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	24	0.44
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	24	0.44
(1,925)	1:A:55:GLN:HA	1:A:55:GLN:HG3	21	0.44
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	12	0.44
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	13	0.44
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	13	0.44
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	13	0.44
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	13	0.44
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	13	0.44
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	13	0.44
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	27	0.44
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	27	0.44
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	27	0.44
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	27	0.44
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	27	0.44
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	27	0.44



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

(1,80) 1:A:89:VAL:HG12 1:A:63:PRO:HG3 28 0.44 (1,80) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 28 0.44 (1,80) 1:A:89:VAL:HG21 1:A:63:PRO:HG3 28 0.44 (1,80) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:63:PRO:HG3 28 0.44 (1,80) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:63:PRO:HG3 28 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 20 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 20 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,80) 1:A:89:VAL:HG21 1:A:63:PRO:HG3 28 0.44 (1,80) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:63:PRO:HG3 28 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 20 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 0.44 (1,26) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 0.44 (1,26) 1:A:113:LEU:HD24 1:A:117:LYS:HE2 0.44 (1,26) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 0.44 (1,26) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 0.44 (1,26) 1:A	(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	28	0.44
(1,80) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:63:PRO:HG3 28 0.44 (1,80) 1:A:89:VAL:HG23 1:A:63:PRO:HG3 28 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 27 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 29 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 20 0.44 (1,26) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 20 0.44 (1,26) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 20 0.44 (1,26) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 6 0.44 (1,26) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 6 0.44 (1,26) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 7 0.44 (1,26) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 7 0.44 (1,26) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 7 0.44	(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	28	0.44
(1,80) 1:A:89:VAL:HG23 1:A:63:PRO:HG3 28 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 20 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 8 0.44 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 8 0.44 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 15 0.44 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 15 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 6 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 7 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 7 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 7 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 7 0.44 (1,1447) 1:A:16:THR:HG23 1:A:17:GLU:HA 2 0.44 (1,1	(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	28	0.44
(1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 12 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 12 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 12 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 12 0.44 (1,76) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 12 0.44 (1,76) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:17:LYS:HE2 12 0.44 (1,76) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:17:LYS:HE2 12 0.44 (1,76) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:17:LYS:HE2 12 0.44 (1,76) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:17:LYS:HE2 12 0.44 (1,76) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:17:LYS:HE2 12 0.44 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:57:PHE:HD1 8 0.44 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 8 0.44 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 15 0.44 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD2 15 0.44 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD2 15 0.44 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD2 15 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 6 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:17:LYS:HE2 7 0.44 (1,1447) 1:A:16:THR	(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	28	0.44
(1,76) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 20 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 19 0.44 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 8 0.44 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 8 0.44 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 15 0.44 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 15 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 6 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 7 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 6 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 7 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 7 0.44 (1,1447) 1:A:16:THR:HG23 1:A:17:GLU:HA 2 0.44 (1,1447) 1:A:16:THR:HG23 1:A:17:GLU:HA 2 0.44 (1,1447) 1:A:16:THR:HG23 1:A:17:GLU:HA 2 0.44 (1,1057) 1:A	(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	28	0.44
(1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:13:LEU:HD14 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:13:LEU:HD15 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:13:LEU:HD15 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:57:PHE:HD1 8 0.44 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD2 15 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 6 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 7 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 6 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 7 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 7 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 7 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 7 0.44 (1,1447) 1:A:16:THR:HG22 1:A:17:GLU:HA 2 0.44 (1,1447) 1:A:16:THR:HG22 1:A:17:GLU:HA 2 0.44 (1,1447) 1:A:16:THR:HG23 1:A:17:GLU:HA 2 0.44 (1,1057) 1:A:	(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	5	0.44
(1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 5 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 12 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 12 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 12 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 12 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 12 0.44 (1,76) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 12 0.44 (1,76) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 12 0.44 (1,76) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 12 0.44 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 19 0.44 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 8 0.44 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 8 0.44 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 15 0.44 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD2 15 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:17:LYS:HE2 6 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:17:LYS:HE2 6 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 7 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 7 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 7 0.44 (1,1447) 1:A:16:THR:HG23 1:A:17:GLU:HA 2 0.44 (1,1447) 1:A:16:THR:HG23 1:A:17:GLU:HA 2 0.44 (1,1447) 1:A:16:THR:HG23 1:A:17:GLU:HA 2 0.44 (1,1057) 1	(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	5	0.44
(1,76)	(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	5	0.44
(1,76)	(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	5	0.44
(1,76)	(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	5	0.44
(1,76) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 19 0.44 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 8 0.44 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 8 0.44 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 15 0.44 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 15 0.44 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD2 8 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 6 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 6 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 6 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 7 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 7 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 7 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 7 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 7 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 7 0.44 (1,247) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 2 0.44 (1,1447) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 2 0.44 (1,1447) 1:A:16:THR:HG22 1:A:17:GLU:HA 2 0.44 (1,1447) 1:A:16:THR:HG22 1:A:17:GLU:HA 2 0.44 (1,1447) 1:A:16:THR:HG23 1:A:17:GLU:HA 2 0.44 (1,1057) 1:A:120:ILE:HG13 1:A:120:ILE:HG21 5 0.44 (1,1057) 1:A:120:ILE:HG13 1:A:120:ILE:HG21 5 0.44 (1,1057) 1:A	(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	5	0.44
(1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 16 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,76) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 22 0.44 (1,641) 1:A:52:ASN:HB2 1:A:53:LYS:H 19 0.44 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 8 0.44 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 8 0.44 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 15 0.44 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 15 0.44 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD2 15 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 6 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 6 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 6 0.44 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 7 0.44 (1,247) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 2 0.44 (1,1447) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 2 0.44 (1,1447) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 2 0.44 (1,1447) 1:A:16:THR:HG22 1:A:17:GLU:HA 2 0.44 (1,1447) 1:A:16:THR:HG23 1	(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	16	0.44
(1,76)         1:A:113:LEU:HD11         1:A:117:LYS:HE2         16         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD12         1:A:117:LYS:HE2         16         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         16         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD22         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD11         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:517:PHE:HD2         22         0.44           (1,76)         1:A:13:LEU:HD13         1:A:57:PHE:HD2         22         0.44           (1,76)         1:A:13:LEU:HD13         1:A:57:PHE:HD1         8         0.44           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         8         0.44           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2 <t< td=""><td>(1,76)</td><td>1:A:113:LEU:HD22</td><td>1:A:117:LYS:HE2</td><td>16</td><td>0.44</td></t<>	(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	16	0.44
(1,76)         1:A:113:LEU:HD11         1:A:117:LYS:HE2         16         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD12         1:A:117:LYS:HE2         16         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         16         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD22         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD11         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD12         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:13:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:13:LEU:HD13         1:A:517:PHE:HD2         22         0.44           (1,76)         1:A:13:LEU:HD13         1:A:57:PHE:HD1         8         0.44           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         8         0.44           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2 <t< td=""><td>(1,76)</td><td>1:A:113:LEU:HD23</td><td>1:A:117:LYS:HE2</td><td>16</td><td>0.44</td></t<>	(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	16	0.44
(1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         16         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD22         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD12         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:53:LYS:H         19         0.44           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         8         0.44           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         15         0.44           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         15         0.44           (1,388)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:70:HIS:H         28         0.44           (1,226)         1:A:113:LEU:HD22         1:	(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	16	0.44
(1,76)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD22         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD11         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD12         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:13:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:13:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:13:LEU:HD13         1:A:53:LYS:H         19         0.44           (1,641)         1:A:52:ASN:HB2         1:A:57:PHE:HD1         8         0.44           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         8         0.44           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         15         0.44           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         15         0.44           (1,388)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:17	(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	16	0.44
(1,76)         1:A:113:LEU:HD22         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD11         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD12         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:53:LYS:H         19         0.44           (1,641)         1:A:55:ASN:HB2         1:A:53:LYS:H         19         0.44           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         8         0.44           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         15         0.44           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         15         0.44           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:17:LYS:HE2         6         0.44           (1,388)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:70:HIS:H         28         0.44           (1,226)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:L	(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	16	0.44
(1,76)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD11         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD12         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:17:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:13:LEU:HD13         1:A:53:LYS:H         19         0.44           (1,641)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         8         0.44           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         15         0.44           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:70:HIS:H         28         0.44           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:70:HIS:H         28         0.44           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:17:LYS:HE2         6         0.44           (1,226)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:17:LYS:HE2         6         0.44           (1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:17:LYS	· ' /	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	22	0.44
(1,76)         1:A:113:LEU:HD11         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD12         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,641)         1:A:52:ASN:HB2         1:A:53:LYS:H         19         0.44           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         8         0.44           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         15         0.44           (1,388)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:70:HIS:H         28         0.44           (1,226)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         6         0.44           (1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         7         0.44           (1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117	(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	22	0.44
(1,76)         1:A:113:LEU:HD11         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD12         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,641)         1:A:52:ASN:HB2         1:A:53:LYS:H         19         0.44           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         8         0.44           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         15         0.44           (1,388)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:70:HIS:H         28         0.44           (1,226)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         6         0.44           (1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         7         0.44           (1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117	(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	22	0.44
(1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         22         0.44           (1,641)         1:A:52:ASN:HB2         1:A:53:LYS:H         19         0.44           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         8         0.44           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         8         0.44           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         15         0.44           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         15         0.44           (1,388)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:70:HIS:H         28         0.44           (1,226)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         6         0.44           (1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         7         0.44           (1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         7         0.44           (1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:GLU:	(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	22	0.44
(1,641)       1:A:52:ASN:HB2       1:A:53:LYS:H       19       0.44         (1,393)       1:A:63:PRO:HD2       1:A:57:PHE:HD1       8       0.44         (1,393)       1:A:63:PRO:HD2       1:A:57:PHE:HD2       8       0.44         (1,393)       1:A:63:PRO:HD2       1:A:57:PHE:HD1       15       0.44         (1,393)       1:A:63:PRO:HD2       1:A:57:PHE:HD2       15       0.44         (1,388)       1:A:70:HIS:HB3       1:A:70:HIS:H       28       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       6       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       6       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG21       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG23	(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	22	0.44
(1,393)       1:A:63:PRO:HD2       1:A:57:PHE:HD1       8       0.44         (1,393)       1:A:63:PRO:HD2       1:A:57:PHE:HD2       8       0.44         (1,393)       1:A:63:PRO:HD2       1:A:57:PHE:HD1       15       0.44         (1,393)       1:A:63:PRO:HD2       1:A:57:PHE:HD2       15       0.44         (1,398)       1:A:70:HIS:HB3       1:A:70:HIS:H       28       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       6       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       6       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG21       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13	(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	22	0.44
(1,393)       1:A:63:PRO:HD2       1:A:57:PHE:HD2       8       0.44         (1,393)       1:A:63:PRO:HD2       1:A:57:PHE:HD1       15       0.44         (1,393)       1:A:63:PRO:HD2       1:A:57:PHE:HD2       15       0.44         (1,388)       1:A:70:HIS:HB3       1:A:70:HIS:H       28       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       6       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       6       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG21       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       5       0.44         (1,1057)       1:A:1210:ILE:HG13	(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	19	0.44
(1,393)       1:A:63:PRO:HD2       1:A:57:PHE:HD1       15       0.44         (1,393)       1:A:63:PRO:HD2       1:A:57:PHE:HD2       15       0.44         (1,388)       1:A:70:HIS:HB3       1:A:70:HIS:H       28       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       6       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       6       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG21       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1393)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD2       27       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       5       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13	(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	8	0.44
(1,393)       1:A:63:PRO:HD2       1:A:57:PHE:HD2       15       0.44         (1,388)       1:A:70:HIS:HB3       1:A:70:HIS:H       28       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       6       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       6       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG21       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       5       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       5       0.44	(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	8	0.44
(1,388)       1:A:70:HIS:HB3       1:A:70:HIS:H       28       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       6       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       6       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:17:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG21       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1393)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD2       27       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       5       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       5       0.44	(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	15	0.44
(1,226)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       6       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       6       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       6       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG21       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1393)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD2       27       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       5       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       5       0.44	(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	15	0.44
(1,226)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       6       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       6       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       6       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG21       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1393)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD2       27       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       5       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       5       0.44	(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	28	0.44
(1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       6       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG21       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG22       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1393)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD2       27       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       5       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       5       0.44	(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	6	0.44
(1,226)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG21       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG22       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD2       27       0.44         (1,1393)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD2       27       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       5       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       5       0.44	(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	6	0.44
(1,226)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG21       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG22       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1393)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD2       27       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       5       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       5       0.44	(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	6	0.44
(1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG21       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG22       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1393)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD2       27       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       5       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       5       0.44	(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	7	0.44
(1,226)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       7       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG21       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG22       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1393)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD2       27       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       5       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       5       0.44	/	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	7	0.44
(1,1447)       1:A:16:THR:HG22       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1393)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD2       27       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       5       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       5       0.44	· · /	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	7	0.44
(1,1447)       1:A:16:THR:HG22       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1447)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HA       2       0.44         (1,1393)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD2       27       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       5       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       5       0.44	(1,1447)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HA	2	0.44
(1,1393)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD2       27       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       5       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       5       0.44	(1,1447)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HA	2	0.44
(1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       5       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       5       0.44	(1,1447)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HA	2	0.44
(1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       5       0.44         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       5       0.44	(1,1393)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD2	27	0.44
		1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	5	0.44
(1.1057) 1:A:120:ILE:HG13 1:A:120:ILE:HG23 5 0.44	(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	5	0.44
( ) )	(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	5	0.44



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	14	0.44
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	14	0.44
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	14	0.44
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	30	0.44
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	30	0.44
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	30	0.44
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	1	0.43
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	1	0.43
(1,925)	1:A:55:GLN:HA	1:A:55:GLN:HG3	9	0.43
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	5	0.43
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	10	0.43
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	29	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	14	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	14	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	14	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	14	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	14	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	14	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	18	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	18	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	18	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	18	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	18	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	18	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	23	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	23	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	23	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	23	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	23	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	23	0.43
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	15	0.43
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	15	0.43
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	15	0.43
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	15	0.43
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	15	0.43
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	15	0.43
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	21	0.43
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	20	0.43
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	11	0.43
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	11	0.43
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	11	0.43
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	17	0.43



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	17	0.43
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	17	0.43
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	5	0.43
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB2	6	0.43
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB3	6	0.43
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB2	6	0.43
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB3	6	0.43
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB2	6	0.43
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB3	6	0.43
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB2	12	0.43
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB3	12	0.43
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB2	12	0.43
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB3	12	0.43
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB2	12	0.43
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB3	12	0.43
(1,1171)	1:A:50:VAL:HB	1:A:50:VAL:H	28	0.43
(1,1127)	1:A:55:GLN:HA	1:A:55:GLN:HG2	24	0.43
(1,1127)	1:A:55:GLN:HA	1:A:55:GLN:HG2	27	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	1	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	1	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	1	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	2	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	2	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	2	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	3	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	3	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	3	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	6	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	6	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	6	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	7	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	7	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	7	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	8	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	8	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	8	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	9	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	9	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	9	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	10	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	10	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	10	0.43



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	11	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	11	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	11	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	12	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	12	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	12	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	13	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	13	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	13	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	15	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	15	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	15	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	16	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	16	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	16	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	17	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	17	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	17	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	18	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	18	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	18	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	19	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	19	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	19	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	20	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	20	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	20	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	21	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	21	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	21	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	22	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	22	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	22	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	23	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	23	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	23	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	24	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	24	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	24	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	26	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	26	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	26	0.43



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

( ) · · · · · · · · · · · · · · · · · ·		Model	Violation (Å)
(1,1057) 1:A:120:ILE:HG13	3 1:A:120:ILE:HG21	27	0.43
(1,1057) 1:A:120:ILE:HG13	3 1:A:120:ILE:HG22	27	0.43
(1,1057) 1:A:120:ILE:HG13	3 1:A:120:ILE:HG23	27	0.43
(1,1057) 1:A:120:ILE:HG13	3 1:A:120:ILE:HG21	28	0.43
(1,1057) 1:A:120:ILE:HG13	3 1:A:120:ILE:HG22	28	0.43
(1,1057) 1:A:120:ILE:HG13	3 1:A:120:ILE:HG23	28	0.43
(1,1057) 1:A:120:ILE:HG13	3 1:A:120:ILE:HG21	29	0.43
(1,1057) 1:A:120:ILE:HG13	3 1:A:120:ILE:HG22	29	0.43
(1,1057) 1:A:120:ILE:HG13	3 1:A:120:ILE:HG23	29	0.43
(1,1039) 1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	15	0.43
(1,1039) 1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	15	0.43
(1,1039) 1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	15	0.43
(1,960) 1:A:104:GLY:HA3	3 1:A:107:CYS:HB2	12	0.42
(1,960) 1:A:104:GLY:HA3	3 1:A:107:CYS:HB3	12	0.42
(1,960) 1:A:104:GLY:HA3	3 1:A:107:CYS:HB2	17	0.42
(1,960) 1:A:104:GLY:HA3	3 1:A:107:CYS:HB3	17	0.42
(1,960) 1:A:104:GLY:HA3	3 1:A:107:CYS:HB2	22	0.42
(1,960) 1:A:104:GLY:HA3	3 1:A:107:CYS:HB3	22	0.42
(1,920) 1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	13	0.42
(1,920) 1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	14	0.42
(1,920) 1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	28	0.42
(1,826) 1:A:87:LYS:HA	1:A:87:LYS:HG2	10	0.42
(1,80) 1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	4	0.42
(1,80) 1:A:89:VAL:HG12	2 1:A:63:PRO:HG3	4	0.42
(1,80) 1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	4	0.42
(1,80) 1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	4	0.42
(1,80) 1:A:89:VAL:HG22	2 1:A:63:PRO:HG3	4	0.42
(1,80) 1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	4	0.42
(1,80) 1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	6	0.42
(1,80) 1:A:89:VAL:HG12	2 1:A:63:PRO:HG3	6	0.42
(1,80) 1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	6	0.42
(1,80) 1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	6	0.42
(1,80) 1:A:89:VAL:HG22	2 1:A:63:PRO:HG3	6	0.42
(1,80) 1:A:89:VAL:HG23		6	0.42
(1,80) 1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	15	0.42
(1,80) 1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	15	0.42
(1,80) 1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	15	0.42
(1,80) 1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	15	0.42
(1,80) 1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	15	0.42
(1,80) 1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	15	0.42
(1,80) 1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	21	0.42
(1,80) 1:A:89:VAL:HG12	2 1:A:63:PRO:HG3	21	0.42



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

(1,80) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 21 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG21 1:A:63:PRO:HG3 21 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:63:PRO:HG3 21 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:63:PRO:HG3 21 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG23 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG12 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG12 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG23 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG21 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:133:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:133:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 2 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 2 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 1 9 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 1 9 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 23 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 23 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 23 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 24 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 25 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 26 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 28 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 24 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 25 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 26 0.42 (1,397) 1:A:5	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,80) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:63:PRO:HG3 21 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG12 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG21 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:13:LEU:HD14 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 2 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 2 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 2 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 19 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 23 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 28 0.42 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 28 0.42 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 28 0.42 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 28 0.42 (1,207) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE22 28 0.42 (1,207) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE22 28 0.42 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE1 14 0.42 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE2 14 0.42 (1,1597	(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	21	0.42
(1,80) 1:A:89:VAL:HG23 1:A:63:PRO:HG3 21 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG12 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG21 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG23 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 2 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 19 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 2 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 4 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 2 0 0.42 (1,393) 1:A:33:LYS:HD3 1:A:13:LYS:HE2 2 8 0.42 (1,397) 1:A:33:LYS:HD	(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	21	0.42
(1,80) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG12 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG21 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG21 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG23 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG23 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 2 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 2 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 2 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 19 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 2 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 23 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 23 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 23 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 20 0.42 (1,397) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE2 14 0.42 (1,397) 1:A:53:LYS:H	(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	21	0.42
(1,80) 1:A:89:VAL:HG12 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG21 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG21 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,76) 1:A:13:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 2 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 2 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 2 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 19 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 19 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 23 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 28 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 28 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 28 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD2 28 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 28 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD2 28 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD2 28 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 26 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD2 28 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 26 0.42 (1,393) 1:A:63:PR	(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	21	0.42
(1,80)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         24         0.42           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         24         0.42           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         24         0.42           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         24         0.42           (1,76)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         9         0.42           (1,76)         1:A:113:LEU:HD12         1:A:117:LYS:HE2         9         0.42           (1,76)         1:A:113:LEU:HD11         1:A:117:LYS:HE2         9         0.42           (1,76)         1:A:113:LEU:HD12         1:A:117:LYS:HE2         9         0.42           (1,76)         1:A:113:LEU:HD12         1:A:117:LYS:HE2         9         0.42           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         9         0.42           (1,76)         1:A:13:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         9         0.42           (1,76)         1:A:13:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         9         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         2         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:	(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	24	0.42
(1,80) 1:A:89:VAL:HG21 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG23 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,55) 1:A:96:ASN:H 1:A:92:ASN:HD22 9 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 2 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 2 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 19 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 19 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 19 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 23 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 23 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 24 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 19 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 19 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 23 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 28 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 26 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 26 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 26 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 40 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 26 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1	(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	24	0.42
(1,80) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,80) 1:A:89:VAL:HG23 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 2 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 2 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 2 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 19 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 23 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 28 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 28 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD2 28 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD2 28 0.42 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 28 0.42 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 28 0.42 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 28 0.42 (1,207) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE22 28 0.42 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE1 14 0.42 (1,1587) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE2 14 0.42 (1,1587) 1:A:55:GLN:HB3 1:A:120:ILE:HG23 4 0.42 (1,1057) 1:A:120:ILE:HG13 1:A:120:ILE:HG22 25 0.42 (1,1057) 1:A:120:ILE:HG13 1:A:1	(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	24	0.42
(1,80) 1:A:89:VAL:HG23 1:A:63:PRO:HG3 24 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 9 0.42 (1,555) 1:A:96:ASN:H 1:A:92:ASN:HD22 9 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 2 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 2 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 19 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 19 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 23 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 23 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 23 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 26 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 28 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 28 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 28 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 26 0.42 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 40.42 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 28 0.42 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD2 1:A:14:TYR:HE1 14 0.42 (1,1597) 1:A:53:LYS:HD3 1:A:14:TYR:HE2 14 0.42 (1,1597) 1:A:120:ILE:HG31 1:A:120:ILE:HG22 4 0.42 (1,1057) 1:A:120:ILE:HG31 1:A:120:ILE:HG22 5 0.42 (1,1057) 1:A:120:ILE:HG31 1:A:120:ILE:HG22	(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	24	0.42
(1,76)	(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	24	0.42
(1,76)	(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	24	0.42
(1,76)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         9         0.42           (1,76)         1:A:113:LEU:HD11         1:A:117:LYS:HE2         9         0.42           (1,76)         1:A:113:LEU:HD12         1:A:117:LYS:HE2         9         0.42           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         9         0.42           (1,555)         1:A:96:ASN:H         1:A:92:ASN:HD22         9         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         2         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         19         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         19         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         19         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         23         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1<	(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	9	0.42
(1,76)	(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	9	0.42
(1,76)         1:A:113:LEU:HD12         1:A:117:LYS:HE2         9         0.42           (1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         9         0.42           (1,555)         1:A:96:ASN:H         1:A:92:ASN:HD22         9         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         2         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         19         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         19         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         19         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         23         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         23         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:14:TYE:HED1         26         0.42           (1,393)         1:A:64:TyA:HE3         1:A:4:TYE:HE3 <td>(1,76)</td> <td>1:A:113:LEU:HD23</td> <td>1:A:117:LYS:HE2</td> <td>9</td> <td>0.42</td>	(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	9	0.42
(1,76)         1:A:113:LEU:HD13         1:A:117:LYS:HE2         9         0.42           (1,555)         1:A:96:ASN:H         1:A:92:ASN:HD22         9         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         2         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         19         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         19         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         23         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         23         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         26         0.42           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:34:4:TWE.HE1 </td <td>(1,76)</td> <td>1:A:113:LEU:HD11</td> <td>1:A:117:LYS:HE2</td> <td>9</td> <td>0.42</td>	(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	9	0.42
(1,555)         1:A:96:ASN:H         1:A:92:ASN:HD22         9         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         2         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         2         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         19         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         19         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         23         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         23         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         26         0.42           (1,207)         1:A:55:VAL:HG3         1:A:471:GLN:HE22 <td>(1,76)</td> <td>1:A:113:LEU:HD12</td> <td>1:A:117:LYS:HE2</td> <td>9</td> <td>0.42</td>	(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	9	0.42
(1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         2         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         2         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         19         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         19         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         23         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         23         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         26         0.42           (1,207)         1:A:55:VAL:HG3         1:A:71:GLN:HE22 <td>(1,76)</td> <td>1:A:113:LEU:HD13</td> <td>1:A:117:LYS:HE2</td> <td>9</td> <td>0.42</td>	(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	9	0.42
(1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         2         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         19         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         19         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         23         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         23         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:63:PRO:HD2         26         0.42           (1,246)         1:A:84:GLU:HG3         1:A:84:GLU:HA         11         0.42           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         28         0.42           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         28         0.42           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1<	(1,555)	1:A:96:ASN:H	1:A:92:ASN:HD22	9	0.42
(1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         19         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         19         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         23         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         23         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         10         0.42           (1,266)         1:A:84:GLU:HG3         1:A:84:GLU:HA         11         0.42           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         28         0.42           (1,207)         1:A:5:S:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE1         14         0.42           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE2	(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	2	0.42
(1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         19         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         23         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         23         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         26         0.42           (1,246)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         26         0.42           (1,246)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:48:GLU:HA         11         0.42           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         28         0.42           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         28         0.42           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         14         0.42           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         14         0.42           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:14:TYR:H	(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	2	0.42
(1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         23         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         23         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         26         0.42           (1,246)         1:A:84:GLU:HG3         1:A:84:GLU:HA         11         0.42           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         28         0.42           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         28         0.42           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         28         0.42           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HE1         14         0.42           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE2         14         0.42           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE1         14         0.42           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         14         0.42           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:13:HE2         14         0.42           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3	(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	19	0.42
(1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         23         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         26         0.42           (1,246)         1:A:84:GLU:HG3         1:A:84:GLU:HA         11         0.42           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         28         0.42           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         28         0.42           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         28         0.42           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         28         0.42           (1,207)         1:A:5:S:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HE2         28         0.42           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         14         0.42           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         14         0.42           (1,1597)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:14:TYR:HE2         14         0.42           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:38:PRO:HD2         1         0.42           (1,1587)         1:A:120:ILE:HG13         1:A:12	(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	19	0.42
(1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         26         0.42           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         26         0.42           (1,246)         1:A:84:GLU:HG3         1:A:84:GLU:HA         11         0.42           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         28         0.42           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         28         0.42           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HE2         28         0.42           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE2         14         0.42           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         14         0.42           (1,1597)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:14:TYR:HE2         14         0.42           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         1         0.42           (1,1587)         1:A:120:ILE:HG13         1:A:120	(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	23	0.42
(1,393)       1:A:63:PRO:HD2       1:A:57:PHE:HD2       26       0.42         (1,246)       1:A:84:GLU:HG3       1:A:84:GLU:HA       11       0.42         (1,207)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:71:GLN:HE22       28       0.42         (1,207)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:71:GLN:HE22       28       0.42         (1,207)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:71:GLN:HE22       28       0.42         (1,1597)       1:A:53:LYS:HD2       1:A:14:TYR:HE1       14       0.42         (1,1597)       1:A:53:LYS:HD2       1:A:14:TYR:HE2       14       0.42         (1,1597)       1:A:53:LYS:HD3       1:A:14:TYR:HE1       14       0.42         (1,1597)       1:A:53:LYS:HD3       1:A:14:TYR:HE2       14       0.42         (1,1587)       1:A:36:GLU:HB3       1:A:38:PRO:HD2       1       0.42         (1,1587)       1:A:31:LYS:HA       1:A:36:GLU:HB3       1       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG23       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       25       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:H	(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	23	0.42
(1,246)         1:A:84:GLU:HG3         1:A:84:GLU:HA         11         0.42           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         28         0.42           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         28         0.42           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         28         0.42           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE1         14         0.42           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD2         1:A:14:TYR:HE2         14         0.42           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE1         14         0.42           (1,1597)         1:A:53:LYS:HD3         1:A:14:TYR:HE2         14         0.42           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         1         0.42           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         1         0.42           (1,1057)         1:A:120:ILE:HG13         1:A:120:ILE:HG22         4         0.42           (1,1057)         1:A:120:ILE:HG13         1:A:120:ILE:HG23         4         0.42           (1,1057)         1:A:120:ILE:HG13         1:A:120:ILE:HG21         25         0.42           (1,1057)         1:A:12120:ILE:HG13	(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	26	0.42
(1,207)       1:A:5:VAL:HG11       1:A:71:GLN:HE22       28       0.42         (1,207)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:71:GLN:HE22       28       0.42         (1,207)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:71:GLN:HE22       28       0.42         (1,1597)       1:A:53:LYS:HD2       1:A:14:TYR:HE1       14       0.42         (1,1597)       1:A:53:LYS:HD2       1:A:14:TYR:HE2       14       0.42         (1,1597)       1:A:53:LYS:HD3       1:A:14:TYR:HE1       14       0.42         (1,1597)       1:A:53:LYS:HD3       1:A:14:TYR:HE2       14       0.42         (1,1587)       1:A:36:GLU:HB3       1:A:38:PRO:HD2       1       0.42         (1,1587)       1:A:31:LYS:HA       1:A:36:GLU:HB3       1       0.42         (1,1127)       1:A:55:GLN:HA       1:A:55:GLN:HG2       26       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG23       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       25       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       25       0.42           (1,1057) </td <td>(1,393)</td> <td>1:A:63:PRO:HD2</td> <td>1:A:57:PHE:HD2</td> <td>26</td> <td>0.42</td>	(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	26	0.42
(1,207)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:71:GLN:HE22       28       0.42         (1,207)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:71:GLN:HE22       28       0.42         (1,1597)       1:A:53:LYS:HD2       1:A:14:TYR:HE1       14       0.42         (1,1597)       1:A:53:LYS:HD3       1:A:14:TYR:HE2       14       0.42         (1,1597)       1:A:53:LYS:HD3       1:A:14:TYR:HE2       14       0.42         (1,1597)       1:A:53:LYS:HD3       1:A:14:TYR:HE2       14       0.42         (1,1587)       1:A:36:GLU:HB3       1:A:38:PRO:HD2       1       0.42         (1,1587)       1:A:31:LYS:HA       1:A:36:GLU:HB3       1       0.42         (1,1127)       1:A:55:GLN:HA       1:A:55:GLN:HG2       26       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG23       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       25       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       25       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       25       0.42	(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	11	0.42
(1,207)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:71:GLN:HE22       28       0.42         (1,1597)       1:A:53:LYS:HD2       1:A:14:TYR:HE1       14       0.42         (1,1597)       1:A:53:LYS:HD2       1:A:14:TYR:HE2       14       0.42         (1,1597)       1:A:53:LYS:HD3       1:A:14:TYR:HE1       14       0.42         (1,1597)       1:A:53:LYS:HD3       1:A:14:TYR:HE2       14       0.42         (1,1587)       1:A:36:GLU:HB3       1:A:38:PRO:HD2       1       0.42         (1,1587)       1:A:31:LYS:HA       1:A:36:GLU:HB3       1       0.42         (1,1587)       1:A:55:GLN:HA       1:A:55:GLN:HG2       26       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG23       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       25       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       25       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       25       0.42	(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	28	0.42
(1,1597)       1:A:53:LYS:HD2       1:A:14:TYR:HE1       14       0.42         (1,1597)       1:A:53:LYS:HD2       1:A:14:TYR:HE2       14       0.42         (1,1597)       1:A:53:LYS:HD3       1:A:14:TYR:HE1       14       0.42         (1,1597)       1:A:53:LYS:HD3       1:A:14:TYR:HE2       14       0.42         (1,1587)       1:A:36:GLU:HB3       1:A:38:PRO:HD2       1       0.42         (1,1587)       1:A:31:LYS:HA       1:A:36:GLU:HB3       1       0.42         (1,1127)       1:A:55:GLN:HA       1:A:55:GLN:HG2       26       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       25       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       25       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       25       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       25       0.42	(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	28	0.42
(1,1597)       1:A:53:LYS:HD2       1:A:14:TYR:HE2       14       0.42         (1,1597)       1:A:53:LYS:HD3       1:A:14:TYR:HE1       14       0.42         (1,1597)       1:A:53:LYS:HD3       1:A:14:TYR:HE2       14       0.42         (1,1587)       1:A:36:GLU:HB3       1:A:38:PRO:HD2       1       0.42         (1,1587)       1:A:31:LYS:HA       1:A:36:GLU:HB3       1       0.42         (1,1127)       1:A:55:GLN:HA       1:A:55:GLN:HG2       26       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG23       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       25       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       25       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       25       0.42	(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	28	0.42
(1,1597)       1:A:53:LYS:HD3       1:A:14:TYR:HE1       14       0.42         (1,1597)       1:A:53:LYS:HD3       1:A:14:TYR:HE2       14       0.42         (1,1587)       1:A:36:GLU:HB3       1:A:38:PRO:HD2       1       0.42         (1,1587)       1:A:31:LYS:HA       1:A:36:GLU:HB3       1       0.42         (1,1127)       1:A:55:GLN:HA       1:A:55:GLN:HG2       26       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG23       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       25       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       25       0.42	(1,1597)	1:A:53:LYS:HD2	1:A:14:TYR:HE1	14	0.42
(1,1597)       1:A:53:LYS:HD3       1:A:14:TYR:HE2       14       0.42         (1,1587)       1:A:36:GLU:HB3       1:A:38:PRO:HD2       1       0.42         (1,1587)       1:A:31:LYS:HA       1:A:36:GLU:HB3       1       0.42         (1,1127)       1:A:55:GLN:HA       1:A:55:GLN:HG2       26       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG23       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       25       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       25       0.42	(1,1597)	1:A:53:LYS:HD2	1:A:14:TYR:HE2	14	0.42
(1,1587)       1:A:36:GLU:HB3       1:A:38:PRO:HD2       1       0.42         (1,1587)       1:A:31:LYS:HA       1:A:36:GLU:HB3       1       0.42         (1,1127)       1:A:55:GLN:HA       1:A:55:GLN:HG2       26       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG23       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       25       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       25       0.42	(1,1597)	1:A:53:LYS:HD3	1:A:14:TYR:HE1	14	0.42
(1,1587)       1:A:31:LYS:HA       1:A:36:GLU:HB3       1       0.42         (1,1127)       1:A:55:GLN:HA       1:A:55:GLN:HG2       26       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG23       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       25       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       25       0.42	(1,1597)	1:A:53:LYS:HD3	1:A:14:TYR:HE2	14	0.42
(1,1587)       1:A:31:LYS:HA       1:A:36:GLU:HB3       1       0.42         (1,1127)       1:A:55:GLN:HA       1:A:55:GLN:HG2       26       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG23       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       25       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       25       0.42	· · /	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	1	0.42
(1,1127)       1:A:55:GLN:HA       1:A:55:GLN:HG2       26       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG23       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       25       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       25       0.42		1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	1	0.42
(1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG23       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       25       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       25       0.42	, ,	1:A:55:GLN:HA	1:A:55:GLN:HG2	26	0.42
(1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG23       4       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       25       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       25       0.42	(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	4	0.42
(1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG21       25       0.42         (1,1057)       1:A:120:ILE:HG13       1:A:120:ILE:HG22       25       0.42	(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	4	0.42
(1,1057) 1:A:120:ILE:HG13 1:A:120:ILE:HG22 25 0.42	(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	4	0.42
	(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	25	0.42
(1.10FF) 1.4.100 H.D.H.C.10. 1.4.100 H.D.H.C.20. 07	(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	25	0.42
(1,1057)   1:A:120:1LE:HG13   1:A:120:1LE:HG23   25   0.42	(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	25	0.42



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	2	0.42
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	2	0.42
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	2	0.42
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	29	0.41
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	29	0.41
(1,925)	1:A:55:GLN:HA	1:A:55:GLN:HG3	20	0.41
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	21	0.41
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	20	0.41
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	20	0.41
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	20	0.41
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	20	0.41
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	20	0.41
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	20	0.41
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	13	0.41
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	13	0.41
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	13	0.41
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	13	0.41
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	13	0.41
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	13	0.41
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	17	0.41
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	17	0.41
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	17	0.41
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	17	0.41
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	17	0.41
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	17	0.41
(1,533)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:50:VAL:HA	18	0.41
(1,533)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:50:VAL:HA	18	0.41
(1,533)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:50:VAL:HA	18	0.41
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	4	0.41
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	4	0.41
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	27	0.41
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	27	0.41
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	22	0.41
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	22	0.41
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	22	0.41
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	19	0.41
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	12	0.41
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	2	0.4
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	2	0.4
(1,925)	1:A:55:GLN:HA	1:A:55:GLN:HG3	3	0.4
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	8	0.4
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	Continue	0.4



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

(1,920)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         27         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         2         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         2         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         2         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         2         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         2         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         2         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         10	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         2         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         2         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         2         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         2         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         10	(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	27	0.4
(1,80)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         2         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         2         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         2         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         10	(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	2	0.4
(1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         2         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         2         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         2         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         11 <td>(1,80)</td> <td>1:A:89:VAL:HG12</td> <td>1:A:63:PRO:HG3</td> <td>2</td> <td>0.4</td>	(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	2	0.4
(1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         2         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         2         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         11 </td <td>(1,80)</td> <td>1:A:89:VAL:HG13</td> <td>1:A:63:PRO:HG3</td> <td>2</td> <td>0.4</td>	(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	2	0.4
(1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         2         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         11         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         11         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         11 </td <td>(1,80)</td> <td>1:A:89:VAL:HG21</td> <td>1:A:63:PRO:HG3</td> <td>2</td> <td>0.4</td>	(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	2	0.4
(1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         11         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         11         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         11<	(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	2	0.4
(1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       3       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       3       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       3       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       3       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3	(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	2	0.4
(1,80)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         11         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         11         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         11         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         11         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3	(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	3	0.4
(1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         3         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         10         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         11         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         11         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         11         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         11         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         11         0.4           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3	(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	3	0.4
(1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       3       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       3       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3 <td>(1,80)</td> <td>1:A:89:VAL:HG13</td> <td>1:A:63:PRO:HG3</td> <td>3</td> <td>0.4</td>	(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	3	0.4
(1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       3       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4	(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	3	0.4
(1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4	(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	3	0.4
(1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4	(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	3	0.4
(1,80)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4	(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	10	0.4
(1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4	(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	10	0.4
(1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4	(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	10	0.4
(1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       10       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4	(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	10	0.4
(1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4	(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	10	0.4
(1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4	(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	10	0.4
(1,80)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4	(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	11	0.4
(1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4	(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	11	0.4
(1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4	(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	11	0.4
(1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       11       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4	(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	11	0.4
(1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       29       0.4	(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	11	0.4
(1,80) 1:A:89:VAL:HG12 1:A:63:PRO:HG3 29 0.4	(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	11	0.4
	(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	29	0.4
(1.80) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 29 0.4	(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	29	0.4
	(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	29	0.4
(1,80) 1:A:89:VAL:HG21 1:A:63:PRO:HG3 29 0.4	(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	29	0.4
(1,80) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:63:PRO:HG3 29 0.4	(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	29	0.4
(1,80) 1:A:89:VAL:HG23 1:A:63:PRO:HG3 29 0.4	(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	29	0.4
(1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 19 0.4	(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	19	0.4
(1,76) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 19 0.4	(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	19	0.4
(1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 19 0.4	(1,76)		1:A:117:LYS:HE2	19	0.4
(1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 19 0.4	(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	19	0.4
(1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 19 0.4	(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	19	0.4
(1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 19 0.4	(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	19	0.4
(1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 23 0.4	(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	23	0.4
(1,76) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 23 0.4	(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	23	0.4
(1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 23 0.4	(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	23	0.4
(1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 23 0.4	(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	23	0.4
(1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 23 0.4	(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	23	0.4



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

(1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 23 0.4 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 25 0.4 (1,76) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 25 0.4 (1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 25 0.4 (1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 25 0.4 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 25 0.4 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 25 0.4 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 25 0.4 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 25 0.4 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 25 0.4 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 24 0.4 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 24 0.4 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 24 0.4 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 20 0.4 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 20 0.4 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD2 20 0.4 (1,246) 1:A:84:GLU:HG3 1:A:84:GLU:HA 20 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 16 0.4 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 16 0.4 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 16 0.4 (1,1144) 1:A:85:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG21 10 0.4 (1,1144) 1:A:85:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG21 10 0.4 (1,1144) 1:A:85:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG21 10 0.4 (1,1142) 1:A:77:ASP:H 1:A:77:ASP:HB 2 0.3 (1,90) 1:A:48:LYS:HA 1:A:36:GLU:HG2 19 0.4 (1,1142) 1:A:77:ASP:H 1:A:77:ASP:HB 2 0.3 (1,90) 1:A:48:LYS:HA 1:A:36:GLU:HG3 2 0.3 (1,90) 1:A:48:LYS:HA 1:A:48:LYS:HG3 4 0.3 (1,90) 1:A:48:LYS:HA 1:A:48:LYS:H	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,76) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 25 0.4 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 25 0.4 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 25 0.4 (1,76) 1:A:113:LEU:HD11 1:A:117:LYS:HE2 25 0.4 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 25 0.4 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 25 0.4 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 24 0.4 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 24 0.4 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 24 0.4 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 24 0.4 (1,509) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 20 0.4 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 20 0.4 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD2 20 0.4 (1,246) 1:A:84:GLU:HG3 1:A:84:GLU:HA 20 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 16 0.4 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 16 0.4 (1,1587) 1:A:38:CJ:HB3 16 0.4 (1,1144) 1:A:85:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG21 10 0.4 (1,1144) 1:A:85:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG21 10 0.4 (1,1144) 1:A:85:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG23 10 0.4 (1,1142) 1:A:77:ASP:H 1:A:77:ASP:H 1:A:77:ASP:HB3 22 0.4 (1,105) 1:A:81:VS:HA 1:A:85:VAL:HG23 10 0.4 (1,1142) 1:A:77:ASP:H 1:A:77:ASP:HB3 22 0.4 (1,105) 1:A:81:VS:HA 1:A:85:VAL:HG23 10 0.4 (1,1142) 1:A:77:ASP:H 1:A:77:ASP:HB3 22 0.4 (1,105) 1:A:81:VS:HA 1:A:85:VAL:HG23 10 0.4 (1,1142) 1:A:81:VS:HA 1:A:85:VAL:HG23 10 0.4 (1,1142) 1:A:81:VS:HA 1:A:85:VAL:HG23 10 0.4 (1,1142) 1:A:77:ASP:H 1:A:77:ASP:HB3 22 0.4 (1,105) 1:A:81:VS:HA 1:A:85:VAL:HG23 10 0.4 (1,1142) 1:A:83:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG23 10 0.4 (1,1142) 1:A:77:ASP:H 1:A:77:ASP:HB3 22 0.4 (1,105) 1:A:81:VS:HA 1:A:83:VAL:HG23 10 0.4 (1,1142) 1:A:77:ASP:H 1:A:77:ASP:HB3 22 0.4 (1,105) 1:A:81:VS:HA 1:A:83:VAL:HG23 10 0.4 (1,105) 1:A:81:VS:HA 1:A:83:VAL:HG23 10 0.3 (1,000) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 25	(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	23	0.4
(1,76)	(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	25	0.4
(1,76)	(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	25	0.4
(1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 25 0.4 (1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 25 0.4 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 24 0.4 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 24 0.4 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 24 0.4 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 24 0.4 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 20 0.4 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 20 0.4 (1,246) 1:A:84:GLU:HG3 1:A:84:GLU:HA 20 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,226) 1:A:13:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,226) 1:A:13:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 16 0.4 (1,1144) 1:A:85:VAL:HA 1:A:36:GLU:HB3 16 0.4 (1,1144) 1:A:85:VAL:HA 1:A:36:GLU:HB3 16 0.4 (1,1144) 1:A:85:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG21 10 0.4 (1,1144) 1:A:85:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG21 10 0.4 (1,1142) 1:A:77:ASP:H 1:A:77:ASP:HB 2 0.4 (1,105) 1:A:81:LY:HA 1:A:85:VAL:HG23 10 0.4 (1,1142) 1:A:77:ASP:H 1:A:77:ASP:HB 20 0.4 (1,105) 1:A:81:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG23 10 0.4 (1,106:LYS:HA 1:A:48:LYS:HG3 4 0.39 (1,909) 1:A:48:LYS:HA 1:A:48:LYS:HG3 4 0.39 (1,909) 1:A:48:LYS:HA 1:A:48:LYS:HG3 4 0.39 (1,909) 1:A:48:LYS:HA 1:A:48:LYS:HG3 4 0.39 (1,909) 1:A:48:VAL:HG21 1:A:63:PRO:HG3 25 0.39 (1,800) 1:A:89:VAL:HG21 1:A:63:PRO:HG3 25 0.39 (1,800)	(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	25	0.4
(1,76) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:117:LYS:HE2 25 0.4 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 24 0.4 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 24 0.4 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 24 0.4 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 20 0.4 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 20 0.4 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD2 20 0.4 (1,246) 1:A:13:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,226) 1:A:13:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,226) 1:A:13:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,256) 1:A:13:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 16 0.4 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 16 0.4 (1,1144) 1:A:85:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG21 10 0.4 (1,1144) 1:A:85:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG21 10 0.4 (1,1144) 1:A:85:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG21 10 0.4 (1,1144) 1:A:85:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG22 10 0.4 (1,1142) 1:A:77:ASP:H 1:A:77:ASP:HB3 2 0.4 (1,105) 1:A:48:LYS:HA 1:A:84:GLU:HG2 19 0.4 (1,106) 1:A:48:LYS:HA 1:A:84:CU:HG2 19 0.4 (1,105) 1:A:81:VAL:HA 1:A:84:GD:HG2 25 0.39 (1,909) 1:A:48:LYS:HA 1:A:48:LYS:HG3 4 0.39 (1,909) 1:A:48:LYS:HA 1:A:63:PRO:HG3 25 0.39 (1,80) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 25 0.39 (1,80) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 25 0.39 (1,80) 1:A:89:VAL:HG21 1:A:63:PRO:HG3 25 0	(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	25	0.4
(1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 24 0.4 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 24 0.4 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 24 0.4 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 20 0.4 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 20 0.4 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD2 20 0.4 (1,246) 1:A:84:GLU:HG3 1:A:84:GLU:HA 20 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,226) 1:A:13:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,256) 1:A:13:LEU:HD23 1:A:17:LYS:HE2 28 0.4 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 16 0.4 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 16 0.4 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 16 0.4 (1,1144) 1:A:85:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG21 10 0.4 (1,1144) 1:A:85:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG21 10 0.4 (1,1144) 1:A:85:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG22 10 0.4 (1,1142) 1:A:77:ASP:H 1:A:77:ASP:HB3 2 0.4 (1,105) 1:A:81:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG23 10 0.4 (1,1142) 1:A:77:ASP:H 1:A:77:ASP:HB3 2 0.4 (1,105) 1:A:81:VAL:HA 1:A:84:GLU:HG2 19 0.4 (1,106) 1:A:81:VAL:HA 1:A:84:GLU:HG2 19 0.4 (1,105) 1:A:81:VAL:HA 1:A:84:GLU:HG2 19 0.4 (1,105) 1:A:89:VAL:HG1 1:A:63:PRO:HD3 2 0.39 (1,909) 1:A:48:LYS:HA 1:A:63:PRO:HD3 2 0.39 (1,909) 1:A:48:LYS:HA 1:A:63:PRO:HD3 2 0.39 (1,800) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 25 0.39 (1,80) 1:A:89:VAL:HG21 1:A:63:PRO:HG3 25 0.39 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:	(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	25	0.4
(1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 24 0.4 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 24 0.4 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 20 0.4 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD2 20 0.4 (1,246) 1:A:84:GLU:HG3 1:A:84:GLU:HA 20 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,226) 1:A:13:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,260) 1:A:13:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 16 0.4 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 16 0.4 (1,1444) 1:A:85:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG21 10 0.4 (1,1144) 1:A:85:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG21 10 0.4 (1,1144) 1:A:85:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG22 10 0.4 (1,1142) 1:A:77:ASP:H 1:A:77:ASP:HB3 2 0.4 (1,105) 1:A:81:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG22 10 0.4 (1,105) 1:A:81:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG23 10 0.4 (1,106) 1:A:81:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG23 10 0.4 (1,105) 1:A:81:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG23 10 0.4 (1,105) 1:A:81:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG23 10 0.4 (1,105) 1:A:81:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG23 10 0.4 (1,106) 1:A:81:VAL:HA 1:A:88:GDU:HG2 19 0.4 (1,969) 1:A:48:LYS:HA 1:A:48:LYS:HG3 4 0.39 (1,960) 1:A:48:LYS:HA 1:A:48:LYS:HG3 4 0.39 (1,960) 1:A:48:LYS:HA 1:A:48:LYS:HG3 5 0.39 (1,80) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 25 0.39 (1,80) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 25 0.39 (1,80) 1:A:89:VAL:HG21 1:A:63:PRO:HG	(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	25	0.4
(1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 24 0.4 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 20 0.4 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 20 0.4 (1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD2 20 0.4 (1,246) 1:A:84:GLU:HG3 1:A:84:GLU:HA 20 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 9 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,226) 1:A:13:LEU:HD23 1:A:17:LYS:HE2 28 0.4 (1,256) 1:A:13:LEU:HD23 1:A:13:LEU:HD23 1:A:17:LYS:HE2 28 0.4 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 16 0.4 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 16 0.4 (1,1144) 1:A:85:VAL:HA 1:A:85:VAL:HB3 16 0.4 (1,1144) 1:A:85:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG21 10 0.4 (1,1144) 1:A:85:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG22 10 0.4 (1,1144) 1:A:85:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG23 10 0.4 (1,1142) 1:A:77:ASP:H 1:A:77:ASP:HB3 2 0.4 (1,105) 1:A:81:VAL:HA 1:A:84:GLU:HG2 19 0.4 (1,105) 1:A:81:VAL:HA 1:A:84:GLU:HG2 19 0.4 (1,105) 1:A:81:VAL:HA 1:A:84:GLU:HG2 19 0.4 (1,969) 1:A:48:LYS:HA 1:A:48:LYS:HG3 4 0.39 (1,969) 1:A:48:LYS:HA 1:A:63:PRO:HG3 2 0.39 (1,969) 1:A:48:LYS:HA 1:A:63:PRO:HG3 2 0.39 (1,960) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 25 0.39 (1,80) 1:A:89:VAL:HG21 1:A:63:PRO:HG3 25 0.39 (1,80) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:63:PRO:HG3 25 0.39 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 8 0.39 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 8 0.39 (1,76) 1:A:113	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	24	0.4
(1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         20         0.4           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         20         0.4           (1,246)         1:A:84:GLU:HG3         1:A:84:GLU:HA         20         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         9         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         9         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         28         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         28         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         28         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         28         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         28         0.4           (1,266)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         28         0.4           (1,266)         1:A:13:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         28         0.4           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:13:CHU:HB3         16         0.4           (1,1587)         1:A:33:LEU:HA         1:A:36	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	24	0.4
(1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         20         0.4           (1,246)         1:A:84:GLU:HG3         1:A:84:GLU:HA         20         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         9         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD22         1:A:117:LYS:HE2         9         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         28         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         28         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         28         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         28         0.4           (1,226)         1:A:13:LEU:HD23         1:A	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	24	0.4
(1,246)         1:A:84:GLU:HG3         1:A:84:GLU:HA         20         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         9         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD22         1:A:117:LYS:HE2         9         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         9         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         28         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         28         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         28         0.4           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         16         0.4           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         16         0.4           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:VAL:HB3         16         0.4           (1,144)         1:A:85:VAL:HA         1:A:85:VAL:HG21         10         0.4           (1,1144)         1:A:85:VAL:HA         1:A:85:VAL:HG22         10         0.4           (1,142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         2         0.4           (1,142)         1:A:81:VAL:HA         1:A:84:GLU:HG23 </td <td>(1,393)</td> <td>1:A:63:PRO:HD2</td> <td>1:A:57:PHE:HD1</td> <td>20</td> <td>0.4</td>	(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	20	0.4
(1,226)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         9         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD22         1:A:117:LYS:HE2         9         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         9         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         28         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         28         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         28         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         28         0.4           (1,260)         1:A:133:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         28         0.4           (1,126)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         16         0.4           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         16         0.4           (1,1144)         1:A:35:VAL:HA         1:A:35:VAL:HG21         10         0.4           (1,1144)         1:A:85:VAL:HA         1:A:85:VAL:HG22         10         0.4           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         2         0.4           (1,142)         1:A:81:VAL:HA         1:A:84:GLU	(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	20	0.4
(1,226)         1:A:113:LEU:HD22         1:A:117:LYS:HE2         9         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         9         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         28         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         28         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         28         0.4           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         16         0.4           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         16         0.4           (1,1587)         1:A:35:VAL:HA         1:A:36:GLU:HB3         16         0.4           (1,144)         1:A:85:VAL:HA         1:A:85:VAL:HG21         10         0.4           (1,1144)         1:A:85:VAL:HA         1:A:85:VAL:HG22         10         0.4           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         2         0.4           (1,1142)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HB3         22         0.4           (1,105)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         4         0.39           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3 <td>(1,246)</td> <td>1:A:84:GLU:HG3</td> <td>1:A:84:GLU:HA</td> <td>20</td> <td>0.4</td>	(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	20	0.4
(1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         9         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         28         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD22         1:A:117:LYS:HE2         28         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         28         0.4           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         16         0.4           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         16         0.4           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         16         0.4           (1,144)         1:A:85:VAL:HA         1:A:85:VAL:HG21         10         0.4           (1,1144)         1:A:85:VAL:HA         1:A:85:VAL:HG22         10         0.4           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         2         0.4           (1,1142)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HB3         22         0.4           (1,105)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         19         0.4           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         4         0.39           (1,969)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HG3	(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	9	0.4
(1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 28 0.4 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 16 0.4 (1,1587) 1:A:31:LYS:HA 1:A:36:GLU:HB3 16 0.4 (1,1144) 1:A:85:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG21 10 0.4 (1,1144) 1:A:85:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG22 10 0.4 (1,1144) 1:A:85:VAL:HA 1:A:85:VAL:HG22 10 0.4 (1,1144) 1:A:77:ASP:H 1:A:77:ASP:HB3 2 0.4 (1,1142) 1:A:77:ASP:H 1:A:77:ASP:HB3 2 0.4 (1,105) 1:A:81:VAL:HA 1:A:84:GLU:HG2 19 0.4 (1,1069) 1:A:48:LYS:HA 1:A:48:LYS:HG2 4 0.39 (1,969) 1:A:48:LYS:HA 1:A:48:LYS:HG3 4 0.39 (1,934) 1:A:106:LYS:HA 1:A:48:LYS:HG3 2 0.39 (1,920) 1:A:62:GLY:HA2 1:A:63:PRO:HD2 2 0.39 (1,80) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 25 0.39 (1,80) 1:A:89:VAL:HG12 1:A:63:PRO:HG3 25 0.39 (1,80) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 25 0.39 (1,80) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 25 0.39 (1,80) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 25 0.39 (1,80) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 25 0.39 (1,80) 1:A:89:VAL:HG13 1:A:63:PRO:HG3 25 0.39 (1,80) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HG3 25 0.39 (1,80) 1:A:89:VAL:HG21 1:A:63:PRO:HG3 25 0.39 (1,80) 1:A:89:VAL:HG22 1:A:63:PRO:HG3 25 0.39 (1,80) 1:A:89:VAL:HG23 1:A:63:PRO:HG3 25 0.39 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 8 0.39 (1,76) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 8 0.39 (1,76) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 8 0.39 (1,76) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 8 0.39	(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	9	0.4
(1,226)         1:A:113:LEU:HD22         1:A:117:LYS:HE2         28         0.4           (1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         28         0.4           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         16         0.4           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         16         0.4           (1,1144)         1:A:85:VAL:HA         1:A:85:VAL:HG21         10         0.4           (1,1144)         1:A:85:VAL:HA         1:A:85:VAL:HG22         10         0.4           (1,1144)         1:A:85:VAL:HA         1:A:85:VAL:HG23         10         0.4           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         2         0.4           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         22         0.4           (1,105)         1:A:81:VAL:HA         1:A:84:GLU:HG2         19         0.4           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         4         0.39           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         4         0.39           (1,969)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HG3         2         0.39           (1,920)         1:A:69:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3	(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	9	0.4
(1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         28         0.4           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         16         0.4           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         16         0.4           (1,1144)         1:A:85:VAL:HA         1:A:85:VAL:HG21         10         0.4           (1,1144)         1:A:85:VAL:HA         1:A:85:VAL:HG22         10         0.4           (1,1144)         1:A:85:VAL:HA         1:A:85:VAL:HG23         10         0.4           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         2         0.4           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         22         0.4           (1,105)         1:A:81:VAL:HA         1:A:84:GLU:HG2         19         0.4           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         4         0.39           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         4         0.39           (1,920)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HB3         2         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3	(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	28	0.4
(1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         16         0.4           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         16         0.4           (1,1144)         1:A:85:VAL:HA         1:A:85:VAL:HG21         10         0.4           (1,1144)         1:A:85:VAL:HA         1:A:85:VAL:HG22         10         0.4           (1,1144)         1:A:85:VAL:HA         1:A:85:VAL:HG23         10         0.4           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         2         0.4           (1,105)         1:A:81:VAL:HA         1:A:84:GLU:HG2         19         0.4           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         4         0.39           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         4         0.39           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:63:PRO:HG3         2         0.39           (1,994)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HG3         2         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         <	(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	28	0.4
(1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         16         0.4           (1,1144)         1:A:85:VAL:HA         1:A:85:VAL:HG21         10         0.4           (1,1144)         1:A:85:VAL:HA         1:A:85:VAL:HG22         10         0.4           (1,1144)         1:A:85:VAL:HA         1:A:85:VAL:HG23         10         0.4           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         2         0.4           (1,105)         1:A:81:VAL:HA         1:A:84:GLU:HG2         19         0.4           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         4         0.39           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         4         0.39           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         4         0.39           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:63:PRO:HG3         2         0.39           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:63:PRO:HG3         2         0.39           (1,960)         1:A:63:PRO:HG3         2         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39	(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	28	0.4
(1,1144)         1:A:85:VAL:HA         1:A:85:VAL:HG21         10         0.4           (1,1144)         1:A:85:VAL:HA         1:A:85:VAL:HG22         10         0.4           (1,1144)         1:A:85:VAL:HA         1:A:85:VAL:HG23         10         0.4           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         2         0.4           (1,1042)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         22         0.4           (1,105)         1:A:81:VAL:HA         1:A:84:GLU:HG2         19         0.4           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         4         0.39           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         4         0.39           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:400:GLN:HG3         2         0.39           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:63:PRO:HG3         2         0.39           (1,900)         1:A:69:CLY:HA2         1:A:63:PRO:HG3         2         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3 <td< td=""><td>(1,1587)</td><td>1:A:36:GLU:HB3</td><td>1:A:38:PRO:HD2</td><td>16</td><td>0.4</td></td<>	(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	16	0.4
(1,1144)         1:A:85:VAL:HA         1:A:85:VAL:HG22         10         0.4           (1,1144)         1:A:85:VAL:HA         1:A:85:VAL:HG23         10         0.4           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         2         0.4           (1,104)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         22         0.4           (1,105)         1:A:81:VAL:HA         1:A:84:GLU:HG2         19         0.4           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         4         0.39           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         4         0.39           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         4         0.39           (1,960)         1:A:62:GLY:HA         1:A:63:PRO:HG3         2         0.39           (1,920)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3	(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	16	0.4
(1,1144)         1:A:85:VAL:HA         1:A:85:VAL:HG23         10         0.4           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         2         0.4           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         22         0.4           (1,105)         1:A:81:VAL:HA         1:A:84:GLU:HG2         19         0.4           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         4         0.39           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         4         0.39           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:63:PRO:HG3         2         0.39           (1,900)         1:A:69:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         25	(1,1144)	1:A:85:VAL:HA	1:A:85:VAL:HG21	10	0.4
(1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         2         0.4           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         22         0.4           (1,105)         1:A:81:VAL:HA         1:A:84:GLU:HG2         19         0.4           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         4         0.39           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         4         0.39           (1,934)         1:A:106:LYS:HA         1:A:109:GLN:HG3         2         0.39           (1,920)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD3         2         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,76)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         8         0.39           (1,76)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2	(1,1144)	1:A:85:VAL:HA	1:A:85:VAL:HG22	10	0.4
(1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         22         0.4           (1,105)         1:A:81:VAL:HA         1:A:84:GLU:HG2         19         0.4           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         4         0.39           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         4         0.39           (1,934)         1:A:106:LYS:HA         1:A:109:GLN:HG3         2         0.39           (1,920)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,76)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         8         0.39           (1,76)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2	(1,1144)	1:A:85:VAL:HA	1:A:85:VAL:HG23	10	0.4
(1,105)         1:A:81:VAL:HA         1:A:84:GLU:HG2         19         0.4           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         4         0.39           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         4         0.39           (1,934)         1:A:106:LYS:HA         1:A:109:GLN:HG3         2         0.39           (1,920)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         2         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,76)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         8         0.39           (1,76)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         8         0.39           (1,76)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2	(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	2	0.4
(1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         4         0.39           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         4         0.39           (1,934)         1:A:106:LYS:HA         1:A:109:GLN:HG3         2         0.39           (1,920)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         2         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         25         0.39           (1,76)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         8         0.39           (1,76)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         8         0.39           (1,76)         1:A:113:LEU:HD11         1:A:117:LYS:HE2         8         0.39	(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	22	0.4
(1,969)       1:A:48:LYS:HA       1:A:48:LYS:HG3       4       0.39         (1,934)       1:A:106:LYS:HA       1:A:109:GLN:HG3       2       0.39         (1,920)       1:A:62:GLY:HA2       1:A:63:PRO:HD2       2       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD11       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39	(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	19	0.4
(1,934)       1:A:106:LYS:HA       1:A:109:GLN:HG3       2       0.39         (1,920)       1:A:62:GLY:HA2       1:A:63:PRO:HD2       2       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD11       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39	(1,969)	1:A:48:LYS:HA	1:A:48:LYS:HG2	4	0.39
(1,920)       1:A:62:GLY:HA2       1:A:63:PRO:HD2       2       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD11       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39	(1,969)	1:A:48:LYS:HA	1:A:48:LYS:HG3	4	0.39
(1,80)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD11       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39	(1,934)	1:A:106:LYS:HA	1:A:109:GLN:HG3	2	0.39
(1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD11       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39	(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	2	0.39
(1,80)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD11       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39	(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	25	0.39
(1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD11       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39	(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	25	0.39
(1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD11       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39		1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	25	0.39
(1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       25       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD11       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39	· · /	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	25	0.39
(1,76)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD11       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39	(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	25	0.39
(1,76)       1:A:113:LEU:HD21       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD11       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39	(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	25	0.39
(1,76)       1:A:113:LEU:HD22       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD11       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39		1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	8	0.39
(1,76)       1:A:113:LEU:HD23       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39         (1,76)       1:A:113:LEU:HD11       1:A:117:LYS:HE2       8       0.39		1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	8	0.39
		1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	8	0.39
(1,76) 1:A:113:LEU:HD12 1:A:117:LYS:HE2 8 0.39	(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	8	0.39
	(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	8	0.39



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	8	0.39
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	29	0.39
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	29	0.39
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	29	0.39
(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	13	0.39
(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	28	0.39
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	23	0.39
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	23	0.39
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	23	0.39
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	23	0.39
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB2	27	0.39
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB3	27	0.39
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB2	27	0.39
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB3	27	0.39
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB2	27	0.39
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB3	27	0.39
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	7	0.39
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	8	0.39
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	11	0.39
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	14	0.39
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	15	0.39
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	19	0.39
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	24	0.39
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	25	0.39
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	29	0.39
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	1	0.39
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	23	0.38
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	3	0.38
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	16	0.38
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	1	0.38
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	1	0.38
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	1	0.38
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	1	0.38
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	1	0.38
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	1	0.38
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	5	0.38
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	5	0.38
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	11	0.38
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	11	0.38
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	13	0.38
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	13	0.38



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	14	0.38
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	16	0.38
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	16	0.38
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	21	0.38
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	21	0.38
(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	9	0.38
(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	25	0.38
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	5	0.38
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	5	0.38
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	5	0.38
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	14	0.38
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	14	0.38
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	14	0.38
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	18	0.38
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	18	0.38
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	18	0.38
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	19	0.38
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	19	0.38
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	19	0.38
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	7	0.38
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	7	0.38
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	7	0.38
(1,1547)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:38:PRO:HD2	22	0.38
(1,1547)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB2	22	0.38
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	4	0.38
(1,1408)	1:A:16:THR:HG21	1:A:19:VAL:HB	5	0.38
(1,1408)	1:A:16:THR:HG22	1:A:19:VAL:HB	5	0.38
(1,1408)	1:A:16:THR:HG23	1:A:19:VAL:HB	5	0.38
(1,1408)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HG3	5	0.38
(1,1408)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HG3	5	0.38
(1,1408)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HG3	5	0.38
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	3	0.38
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	4	0.38
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	6	0.38
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	9	0.38
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	13	0.38
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	21	0.38
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	21	0.38
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	25	0.38
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	24	0.37
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	2	0.37
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	4	0.37



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	8	0.37
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	9	0.37
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	10	0.37
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	11	0.37
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	14	0.37
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	18	0.37
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	19	0.37
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	20	0.37
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	21	0.37
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	23	0.37
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	28	0.37
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	30	0.37
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	16	0.37
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	16	0.37
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	16	0.37
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	16	0.37
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	16	0.37
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	16	0.37
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	26	0.37
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	26	0.37
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	26	0.37
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	26	0.37
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	26	0.37
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	26	0.37
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	18	0.37
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	18	0.37
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	18	0.37
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	18	0.37
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	18	0.37
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	18	0.37
(1,695)	1:A:27:ASP:H	1:A:27:ASP:HB2	10	0.37
(1,695)	1:A:27:ASP:H	1:A:27:ASP:HB2	20	0.37
(1,695)	1:A:27:ASP:H	1:A:27:ASP:HB2	27	0.37
(1,533)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:50:VAL:HA	28	0.37
(1,533)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:50:VAL:HA	28	0.37
(1,533)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:50:VAL:HA	28	0.37
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	12	0.37
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	12	0.37
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	12	0.37
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	3	0.37
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	3	0.37
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	12	0.37



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

(1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         12         0.37           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD1         24         0.37           (1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         24         0.37           (1,346)         1:A:27:ASP:HA         1:A:27:ASP:HB2         3         0.37           (1,246)         1:A:49:VAL:HG21         1:A:24:ILE:HG12         4         0.37           (1,1602)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:24:ILE:HG12         4         0.37           (1,1602)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:24:ILE:HG12         4         0.37           (1,1602)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:24:ILE:HG12         4         0.37           (1,1602)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:24:ILE:HG12         4         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         10         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         16         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         28         0.37           (1,142)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HB3         30         0.37           (1,142)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,393)         1:A:63:PRO:HD2         1:A:57:PHE:HD2         24         0.37           (1,351)         1:A:27:ASP:HA         1:A:27:ASP:HB2         3         0.37           (1,246)         1:A:84:GLU:HG3         1:A:84:GLU:HA         19         0.37           (1,1602)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:24:ILE:HG12         4         0.37           (1,1602)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:24:ILE:HG12         4         0.37           (1,1602)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:24:ILE:HG12         4         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         10         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         16         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         27         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         28         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         30         0.37           (1,1142)         1:A:48:IVS:HA         1:A:48:IVS:HG2         23         0.36           (1,969)         1:A:48:IVS:HA         1:A:48:IVS:HG2         23         0.36           (1,960)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA	(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	12	0.37
(1,351)         1:A:27:ASP:HA         1:A:27:ASP:HB2         3         0.37           (1,246)         1:A:84:GLU:HG3         1:A:84:GLU:HA         19         0.37           (1,1602)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:24:ILE:HG12         4         0.37           (1,1602)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:24:ILE:HG12         4         0.37           (1,1602)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:24:ILE:HG12         4         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         10         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         16         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         27         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         28         0.37           (1,142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         28         0.37           (1,142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         30         0.37           (1,142)         1:A:48:LVS:HA         1:A:48:LVS:HG2         23         0.36           (1,969)         1:A:48:LVS:HA         1:A:48:LVS:HG3         23         0.36           (1,960)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HD	(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	24	0.37
(1,246)         1:A:84:GLU:HG3         1:A:84:GLU:HA         19         0.37           (1,1602)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:24:ILE:HG12         4         0.37           (1,1602)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:24:ILE:HG12         4         0.37           (1,1602)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:24:ILE:HG12         4         0.37           (1,1602)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         10         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         16         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         27         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         28         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         28         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         30         0.37           (1,142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         28         0.37           (1,142)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         23         0.36           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         23         0.36           (1,960)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA	(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	24	0.37
(1,1602)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:24:ILE:HG12         4         0.37           (1,1602)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:24:ILE:HG12         4         0.37           (1,1602)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:24:ILE:HG12         4         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         10         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         27         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         28         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         28         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         30         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         30         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         30         0.37           (1,1142)         1:A:A:8:LYS:HA         1:A:37:ASP:HB3         30         0.37           (1,1142)         1:A:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         23         0.36           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         23         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA </td <td>(1,351)</td> <td>1:A:27:ASP:HA</td> <td>1:A:27:ASP:HB2</td> <td>3</td> <td>0.37</td>	(1,351)	1:A:27:ASP:HA	1:A:27:ASP:HB2	3	0.37
(1,1602)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:24:ILE:HG12         4         0.37           (1,1602)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:24:ILE:HG12         4         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         10         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         16         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         27         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         28         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         30         0.37           (1,142)         1:A:37:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         30         0.37           (1,142)         1:A:37:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         30         0.37           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         23         0.36           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         23         0.36           (1,960)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         5         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         7         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA	(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	19	0.37
(1,1602)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:24:ILE:HG12         4         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         10         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         16         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         27         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         28         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         30         0.37           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         23         0.36           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         23         0.36           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:63:PRO:HB2         15         0.36           (1,990)         1:A:63:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         5         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         5         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         7         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         15         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA <t< td=""><td>(1,1602)</td><td>1:A:19:VAL:HG21</td><td>1:A:24:ILE:HG12</td><td>4</td><td>0.37</td></t<>	(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	4	0.37
(1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         10         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         16         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         27         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         28         0.37           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         23         0.36           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         23         0.36           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         23         0.36           (1,969)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HD2         15         0.36           (1,960)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HD2         15         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         5         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         7         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         12         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         15         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA <t< td=""><td>(1,1602)</td><td>1:A:19:VAL:HG22</td><td>1:A:24:ILE:HG12</td><td>4</td><td>0.37</td></t<>	(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	4	0.37
(1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         16         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         27         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         28         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         30         0.37           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         23         0.36           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         23         0.36           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         23         0.36           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         23         0.36           (1,960)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HD2         15         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         5         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         7         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         12         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         15         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA <th< td=""><td>(1,1602)</td><td>1:A:19:VAL:HG23</td><td>1:A:24:ILE:HG12</td><td>4</td><td>0.37</td></th<>	(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	4	0.37
(1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         27         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         28         0.37           (1,142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         30         0.37           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         23         0.36           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         23         0.36           (1,990)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         15         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         5         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         6         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         7         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         12         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         15         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         24         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         25         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         2	(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	10	0.37
(1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         28         0.37           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         30         0.37           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         23         0.36           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         23         0.36           (1,920)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         15         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         5         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         6         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         7         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         12         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         15         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         15         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         24         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         25         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA	(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	16	0.37
(1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         30         0.37           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         23         0.36           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         23         0.36           (1,920)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         15         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         5         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         6         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         7         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         12         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         13         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         15         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         24         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         25         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         26         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HB3 <td< td=""><td>(1,1142)</td><td>1:A:77:ASP:H</td><td>1:A:77:ASP:HB3</td><td>27</td><td>0.37</td></td<>	(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	27	0.37
(1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         23         0.36           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         23         0.36           (1,920)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         15         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         5         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         6         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         7         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         12         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         12         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         15         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         15         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         24         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         25         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         26         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HBA <td< td=""><td>(1,1142)</td><td>1:A:77:ASP:H</td><td>1:A:77:ASP:HB3</td><td>28</td><td>0.37</td></td<>	(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	28	0.37
(1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         23         0.36           (1,920)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         15         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         5         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         6         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         7         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         12         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         13         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         15         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         24         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         25         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         26         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         27         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3 <td< td=""><td>(1,1142)</td><td>1:A:77:ASP:H</td><td>1:A:77:ASP:HB3</td><td>30</td><td>0.37</td></td<>	(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	30	0.37
(1,920)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         15         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         5         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         6         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         7         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         12         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         13         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         15         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         24         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         25         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         26         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         27         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         29         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3 <td< td=""><td>(1,969)</td><td>1:A:48:LYS:HA</td><td>1:A:48:LYS:HG2</td><td>23</td><td>0.36</td></td<>	(1,969)	1:A:48:LYS:HA	1:A:48:LYS:HG2	23	0.36
(1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         5         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         6         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         7         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         12         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         13         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         15         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         24         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         25         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         26         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         27         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         29         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3	(1,969)	1:A:48:LYS:HA	1:A:48:LYS:HG3	23	0.36
(1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         6         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         7         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         12         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         13         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         15         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         24         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         25         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         26         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         27         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         29         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         29         0.36           (1,916)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3 <t< td=""><td>(1,920)</td><td>1:A:62:GLY:HA2</td><td>1:A:63:PRO:HD2</td><td>15</td><td>0.36</td></t<>	(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	15	0.36
(1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         7         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         12         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         13         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         15         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         24         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         25         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         26         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         27         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         29         0.36           (1,916)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         <	(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	5	0.36
(1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         12         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         13         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         15         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         24         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         25         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         26         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         27         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         29         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         29         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         <	(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	6	0.36
(1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         13         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         15         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         24         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         25         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         26         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         27         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         29         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,916)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,697)         1:A:88:CYS:HB2         1:A:85:VAL:HA         <	(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	7	0.36
(1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         15         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         24         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         25         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         26         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         27         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         29         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,697)         1:A:88:CYS:HB2         1:A:85:VAL:HA         20         0.36           (1,512)         1:A:91:LYS:HB2         1:A:91:LYS:HA <t< td=""><td>(1,916)</td><td>1:A:38:PRO:HB2</td><td>1:A:38:PRO:HA</td><td>12</td><td>0.36</td></t<>	(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	12	0.36
(1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         24         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         25         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         26         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         27         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         29         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:88:CYS:HB2         1:A:85:VAL:HA         20         0.36           (1,697)         1:A:88:CYS:HB3         1:A:85:VAL:HA         20         0.36           (1,512)         1:A:91:LYS:HB2         1:A:91:LYS:HA <td< td=""><td>(1,916)</td><td>1:A:38:PRO:HB2</td><td>1:A:38:PRO:HA</td><td>13</td><td>0.36</td></td<>	(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	13	0.36
(1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         25         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         26         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         27         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         29         0.36           (1,916)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:88:CYS:HB2         1:A:85:VAL:HA         20         0.36           (1,697)         1:A:88:CYS:HB3         1:A:85:VAL:HA         20         0.36           (1,512)         1:A:91:LYS:HB2         1:A:91:LYS:HA         11         0.36	(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	15	0.36
(1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         26         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         27         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         29         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,697)         1:A:88:CYS:HB2         1:A:85:VAL:HA         20         0.36           (1,512)         1:A:91:LYS:HB2         1:A:91:LYS:HA         11         0.36	(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	24	0.36
(1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         27         0.36           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         29         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:88:CYS:HB2         1:A:85:VAL:HA         20         0.36           (1,697)         1:A:88:CYS:HB3         1:A:85:VAL:HA         20         0.36           (1,512)         1:A:91:LYS:HB2         1:A:91:LYS:HA         11         0.36	(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	25	0.36
(1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         29         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,697)         1:A:88:CYS:HB2         1:A:85:VAL:HA         20         0.36           (1,512)         1:A:91:LYS:HB2         1:A:91:LYS:HA         11         0.36	(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	26	0.36
(1,80)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG21         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG22         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:63:PRO:HG3         8         0.36           (1,80)         1:A:89:VAL:HG23         1:A:85:VAL:HA         20         0.36           (1,697)         1:A:88:CYS:HB2         1:A:85:VAL:HA         20         0.36           (1,512)         1:A:91:LYS:HB2         1:A:91:LYS:HA         11         0.36	(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	27	0.36
(1,80)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HG3       8       0.36         (1,80)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       8       0.36         (1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       8       0.36         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       8       0.36         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       8       0.36         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       8       0.36         (1,697)       1:A:88:CYS:HB2       1:A:85:VAL:HA       20       0.36         (1,697)       1:A:88:CYS:HB3       1:A:85:VAL:HA       20       0.36         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       11       0.36	(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	29	0.36
(1,80)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HG3       8       0.36         (1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       8       0.36         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       8       0.36         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       8       0.36         (1,80)       1:A:88:CYS:HB2       1:A:85:VAL:HA       20       0.36         (1,697)       1:A:88:CYS:HB3       1:A:85:VAL:HA       20       0.36         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       11       0.36	(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	8	0.36
(1,80)       1:A:89:VAL:HG21       1:A:63:PRO:HG3       8       0.36         (1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       8       0.36         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       8       0.36         (1,697)       1:A:88:CYS:HB2       1:A:85:VAL:HA       20       0.36         (1,697)       1:A:88:CYS:HB3       1:A:85:VAL:HA       20       0.36         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       11       0.36	(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	8	0.36
(1,80)       1:A:89:VAL:HG22       1:A:63:PRO:HG3       8       0.36         (1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       8       0.36         (1,697)       1:A:88:CYS:HB2       1:A:85:VAL:HA       20       0.36         (1,697)       1:A:88:CYS:HB3       1:A:85:VAL:HA       20       0.36         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       11       0.36	(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	8	0.36
(1,80)       1:A:89:VAL:HG23       1:A:63:PRO:HG3       8       0.36         (1,697)       1:A:88:CYS:HB2       1:A:85:VAL:HA       20       0.36         (1,697)       1:A:88:CYS:HB3       1:A:85:VAL:HA       20       0.36         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       11       0.36	(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	8	0.36
(1,697)       1:A:88:CYS:HB2       1:A:85:VAL:HA       20       0.36         (1,697)       1:A:88:CYS:HB3       1:A:85:VAL:HA       20       0.36         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       11       0.36	(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	8	0.36
(1,697)       1:A:88:CYS:HB2       1:A:85:VAL:HA       20       0.36         (1,697)       1:A:88:CYS:HB3       1:A:85:VAL:HA       20       0.36         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       11       0.36	(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	8	0.36
(1,512) 1:A:91:LYS:HB2 1:A:91:LYS:HA 11 0.36		1:A:88:CYS:HB2	1:A:85:VAL:HA	20	0.36
	(1,697)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:85:VAL:HA	20	0.36
	(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	11	0.36
		1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	13	0.36
(1,512) 1:A:91:LYS:HB2 1:A:91:LYS:HA 15 0.36	(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	15	0.36
(1,512) 1:A:91:LYS:HB2 1:A:91:LYS:HA 20 0.36	(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	20	0.36
(1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD1 17 0.36	(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	17	0.36
(1,393) 1:A:63:PRO:HD2 1:A:57:PHE:HD2 17 0.36	(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	17	0.36
(1,351) 1:A:27:ASP:HA 1:A:27:ASP:HB2 7 0.36	(1,351)	1:A:27:ASP:HA	1:A:27:ASP:HB2	7	0.36



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

(1,351) 1:A:27:ASP:HA 1:A:27:ASP:HB2 8 0.36 (1,351) 1:A:27:ASP:HA 1:A:27:ASP:HB2 11 0.36 (1,351) 1:A:27:ASP:HA 1:A:27:ASP:HB2 14 0.36 (1,351) 1:A:27:ASP:HA 1:A:27:ASP:HB2 15 0.36 (1,351) 1:A:27:ASP:HA 1:A:27:ASP:HB2 15 0.36 (1,351) 1:A:27:ASP:HA 1:A:27:ASP:HB2 15 0.36 (1,246) 1:A:48:GLU:HG3 1:A:84:GLU:HA 30 0.36 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 1 0.36 (1,226) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 1 0.36 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 1 0.36 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 2 0.36 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 2 0.36 (1,207) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE22 2 0.36 (1,207) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE22 2 0.36 (1,1618) 1:A:43:THR:H 1:A:40:ASP:OD1 21 0.36 (1,1618) 1:A:43:THR:H 1:A:40:ASP:OD1 30 0.36 (1,1618) 1:A:43:THR:H 1:A:40:ASP:OD1 30 0.36 (1,1489) 1:A:93:THR:H 1:A:103:ARG:HH11 10 0.36 (1,1489) 1:A:93:THR:H 1:A:103:ARG:HH11 10 0.36 (1,1489) 1:A:93:THR:H 1:A:103:ARG:HH22 10 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:54:MET:HG3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:54:MET:HG3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:54:MET:HG3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB2 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB2 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG13 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG13 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1376) 1:A:38:PR:HB 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1376) 1:A:38:PR:HB 1:A:1	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,351) 1:A:27:ASP:HA 1:A:27:ASP:HB2 14 0.36 (1,351) 1:A:27:ASP:HA 1:A:27:ASP:HB2 15 0.36 (1,246) 1:A:84:GLU:HG3 1:A:84:GLU:HA 30 0.36 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 1 0.36 (1,226) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 1 0.36 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 1 0.36 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 1 0.36 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 2 0.36 (1,207) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE22 2 0.36 (1,207) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE22 2 0.36 (1,207) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE22 2 0.36 (1,1018) 1:A:3:THR:H 1:A:40:ASP:OD1 21 0.36 (1,1618) 1:A:3:THR:H 1:A:40:ASP:OD1 21 0.36 (1,1618) 1:A:93:THR:H 1:A:103:ARG:HH11 10 0.36 (1,1489) 1:A:93:THR:H 1:A:103:ARG:HH11 10 0.36 (1,1489) 1:A:93:THR:H 1:A:103:ARG:HH12 10 0.36 (1,1489) 1:A:93:THR:H 1:A:103:ARG:HH12 10 0.36 (1,1489) 1:A:93:THR:H 1:A:103:ARG:HH22 10 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:54:MET:HG3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:54:MET:HG3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:54:MET:HG3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB2 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG13 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1376) 1:A:38:PRO:HB2 1:A:38:PRO:HB2 1:A:38:PRO:HB2 1:A:38:PRO:HB2 1:A:38:PRO:HB2 1:A:38:PRO:HB2 1:A:38:PR	(1,351)	1:A:27:ASP:HA	1:A:27:ASP:HB2	8	0.36
(1,351)         1:A:27:ASP:HA         1:A:27:ASP:HB2         15         0.36           (1,246)         1:A:84:GLU:HG3         1:A:84:GLU:HA         30         0.36           (1,226)         1:A:113:LEU:HD21         1:A:117:LYS:HE2         1         0.36           (1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         1         0.36           (1,226)         1:A:13:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         1         0.36           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         2         0.36           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         2         0.36           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         2         0.36           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         2         0.36           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         21         0.36           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         30         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH11         10         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH22         10         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HB	(1,351)	1:A:27:ASP:HA	1:A:27:ASP:HB2	11	0.36
(1,246) 1:A:84:GLU:HG3 1:A:84:GLU:HA 30 0.36 (1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 1 0.36 (1,226) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 1 0.36 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 1 0.36 (1,226) 1:A:13:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 1 0.36 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 2 0.36 (1,207) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE22 2 0.36 (1,207) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE22 2 0.36 (1,207) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE22 2 0.36 (1,108) 1:A:3:THR:H 1:A:40:ASP:OD1 21 0.36 (1,1618) 1:A:43:THR:H 1:A:40:ASP:OD1 21 0.36 (1,1489) 1:A:93:THR:H 1:A:103:ARG:HH11 10 0.36 (1,1489) 1:A:93:THR:H 1:A:103:ARG:HH12 10 0.36 (1,1489) 1:A:93:THR:H 1:A:103:ARG:HH22 10 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:54:MET:HG3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:54:MET:HG3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:54:MET:HG3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB2 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB2 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB2 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB2 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG12 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG13 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG13 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1376) 1:A:38:PO:HB3 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1376	(1,351)	1:A:27:ASP:HA	1:A:27:ASP:HB2	14	0.36
(1,226) 1:A:113:LEU:HD21 1:A:117:LYS:HE2 1 0.36 (1,226) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 1 0.36 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 2 0.36 (1,207) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE22 2 0.36 (1,207) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE22 2 0.36 (1,207) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE22 2 0.36 (1,207) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE22 2 0.36 (1,1618) 1:A:43:THR:H 1:A:40:ASP:OD1 21 0.36 (1,1618) 1:A:43:THR:H 1:A:40:ASP:OD1 21 0.36 (1,1618) 1:A:93:THR:H 1:A:103:ARG:HH11 10 0.36 (1,1489) 1:A:93:THR:H 1:A:103:ARG:HH11 10 0.36 (1,1489) 1:A:93:THR:H 1:A:103:ARG:HH21 10 0.36 (1,1489) 1:A:93:THR:H 1:A:103:ARG:HH21 10 0.36 (1,1489) 1:A:93:THR:H 1:A:103:ARG:HH22 10 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:54:MET:HG3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:54:MET:HG3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB2 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB2 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB2 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB2 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG13 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG13 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG13 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG14 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG14 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG	(1,351)	1:A:27:ASP:HA	1:A:27:ASP:HB2	15	0.36
(1,226) 1:A:113:LEU:HD22 1:A:117:LYS:HE2 1 0.36 (1,226) 1:A:113:LEU:HD23 1:A:117:LYS:HE2 1 0.36 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 2 0.36 (1,207) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE22 2 0.36 (1,207) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE22 2 0.36 (1,1618) 1:A:43:THR:H 1:A:40:ASP:OD1 21 0.36 (1,1618) 1:A:43:THR:H 1:A:40:ASP:OD1 30 0.36 (1,1489) 1:A:93:THR:H 1:A:103:ARG:HH11 10 0.36 (1,1489) 1:A:93:THR:H 1:A:103:ARG:HH12 10 0.36 (1,1489) 1:A:93:THR:H 1:A:103:ARG:HH22 10 0.36 (1,1489) 1:A:93:THR:H 1:A:103:ARG:HH22 10 0.36 (1,1489) 1:A:93:THR:H 1:A:103:ARG:HH22 10 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:54:MET:HG3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG12 1:A:54:MET:HG3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB2 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB2 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG12 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG13 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:77:ASP:HB3 18 0.36 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:77:ASP:HB3 18 0.36 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:77:ASP:HB3 18 0.36 (1,1039) 1:A:48:LYS:HA 1:A:77:ASP:HB3 18 0.36 (1,1039) 1:A:48:LYS:HA 1:A:77:ASP:HB3 18 0.36 (1,1039) 1:A:48:LYS:HA 1:A:10:LYS:HG2 20 0.35 (1,969) 1:A:48:LYS:HA 1:A:48:LYS:HG3 20 0.35 (1,960) 1:A:48:LYS:HA 1:A:48:LYS:HG3 20 0.35 (1,960) 1:A:48:LYS:HA 1:A:48:LYS:HG3 20 0.35 (1,960) 1:A:48:LYS:HA 1:A:48:LYS:HG3 20 0.35 (1,960) 1:A:48:LYS:HA 1:A:48:LYS:HG3 20 0.35 (1,974) 1:A:61:GLU:HB2 1:A:61:GL	(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	30	0.36
(1,226)         1:A:113:LEU:HD23         1:A:117:LYS:HE2         1         0.36           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         2         0.36           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         2         0.36           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         2         0.36           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         21         0.36           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         30         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH11         10         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH21         10         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH21         10         0.36           (1,1489)         1:A:59:THR:H         1:A:103:ARG:HH21         10         0.36           (1,1489)         1:A:59:THR:H         1:A:103:ARG:HH21         10         0.36           (1,1489)         1:A:59:THR:H         1:A:103:ARG:HH21         10         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:54:MET:HG3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:14	(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	1	0.36
(1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 2 0.36 (1,207) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE22 2 0.36 (1,207) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE22 2 0.36 (1,1618) 1:A:43:THR:H 1:A:40:ASP:OD1 21 0.36 (1,1618) 1:A:43:THR:H 1:A:40:ASP:OD1 30 0.36 (1,1489) 1:A:93:THR:H 1:A:103:ARG:HH11 10 0.36 (1,1489) 1:A:93:THR:H 1:A:103:ARG:HH12 10 0.36 (1,1489) 1:A:93:THR:H 1:A:103:ARG:HH21 10 0.36 (1,1489) 1:A:93:THR:H 1:A:103:ARG:HH21 10 0.36 (1,1489) 1:A:93:THR:H 1:A:103:ARG:HH22 10 0.36 (1,1489) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:54:MET:HG3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG12 1:A:54:MET:HG3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG12 1:A:54:MET:HG3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB2 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB2 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG11 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG12 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1376) 1:A:50:VAL:HG13 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:14:TYR:HB3 28 0.36 (1,1039) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE21 13 0.36 (	(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	1	0.36
(1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         2         0.36           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         2         0.36           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         21         0.36           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         30         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH11         10         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH21         10         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH21         10         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH21         10         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH22         10         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:54:MET:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A	(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	1	0.36
(1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         2         0.36           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         21         0.36           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         30         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH12         10         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH21         10         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH22         10         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH21         10         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH21         10         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH21         10         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:4:MET:HG3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:4:TYR:HB2         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:	(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	2	0.36
(1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         21         0.36           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         30         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH11         10         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH12         10         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH21         10         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH22         10         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:54:MET:HG3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:54:MET:HG3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB2         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13 <t< td=""><td>(1,207)</td><td>1:A:5:VAL:HG12</td><td>1:A:71:GLN:HE22</td><td>2</td><td>0.36</td></t<>	(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	2	0.36
(1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         30         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH11         10         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH12         10         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH21         10         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH22         10         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:54:MET:HG3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:54:TYR:HB2         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB2         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13	(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	2	0.36
(1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH11         10         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH12         10         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH21         10         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH22         10         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:54:MET:HG3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:54:MET:HG3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB2         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB2         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13	(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	21	0.36
(1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH12         10         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH21         10         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH22         10         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:54:MET:HG3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB2         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:57:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         18         0.36           (1,142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         18         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11 <th< td=""><td>(1,1618)</td><td>1:A:43:THR:H</td><td>1:A:40:ASP:OD1</td><td>30</td><td>0.36</td></th<>	(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	30	0.36
(1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH21         10         0.36           (1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH22         10         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:54:MET:HG3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB2         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:77:ASP:HB3         18         0.36           (1,142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         18         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:77:GLN:HE21         13         0.36           (1,1039)         1:A:48:LYS:HA	(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH11	10	0.36
(1,1489)         1:A:93:THR:H         1:A:103:ARG:HH22         10         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:54:MET:HG3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:54:MET:HG3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB2         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB2         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HB2         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:70:VAL:HG13         1:A:77:ASP:HB3         18         0.36           (1,142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         18         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,1039)         1:A:48:LYS:HA	(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH12	10	0.36
(1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:54:MET:HG3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:54:MET:HG3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:54:MET:HG3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB2         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB2         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HB2         28         0.36           (1,142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         18         0.36           (1,142)         1:A:77:ASP:H         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,969)         1:A:48:LYS:HA <t< td=""><td>(1,1489)</td><td>1:A:93:THR:H</td><td>1:A:103:ARG:HH21</td><td>10</td><td>0.36</td></t<>	(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH21	10	0.36
(1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:54:MET:HG3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:54:MET:HG3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB2         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:77:ASP:HB3         18         0.36           (1,142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         18         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:77:GLN:HE21         13         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         20         0.35           (1,969)         1:A:48:LYS:HA <t< td=""><td>(1,1489)</td><td>1:A:93:THR:H</td><td>1:A:103:ARG:HH22</td><td>10</td><td>0.36</td></t<>	(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH22	10	0.36
(1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:54:MET:HG3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB2         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB2         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HB2         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:77:ASP:HB3         18         0.36           (1,142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         18         0.36           (1,142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         26         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,1039)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         20         0.35           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1	(1,1376)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:54:MET:HG3	28	0.36
(1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB2         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB2         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HB2         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         18         0.36           (1,142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         26         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         20         0.35           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:63:PRO:HD2         4         0.35           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:	(1,1376)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:54:MET:HG3	28	0.36
(1,1376)         1:A:50:VAL:HG11         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB2         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HB2         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:77:ASP:HB3         18         0.36           (1,142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         18         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,1039)         1:A:48:LYS:HG13         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         20         0.35           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         20         0.35           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HBA         17         0.35           (1,916)         1:A:38:PRO:HBB         1	(1,1376)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:54:MET:HG3	28	0.36
(1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB2         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HB2         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:77:ASP:HB3         18         0.36           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         26         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         20         0.35           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         20         0.35           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HD2         4         0.35           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         17         0.35           (1,944)         1:A:44:MET:HA         1:A:44	(1,1376)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:14:TYR:HB2	28	0.36
(1,1376)         1:A:50:VAL:HG12         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HB2         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:77:ASP:HB3         18         0.36           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         26         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,1039)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         20         0.35           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         20         0.35           (1,969)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         4         0.35           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         17         0.35           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         22         0.35           (1,544)         1:A:44:MET:HA         1:A:44:M	(1,1376)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:14:TYR:HB3	28	0.36
(1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HB2         28         0.36           (1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         18         0.36           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         26         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,1039)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         20         0.35           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         20         0.35           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:63:PRO:HD2         4         0.35           (1,916)         1:A:69:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         4         0.35           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         22         0.35           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:44:MET:HG2         5         0.35           (1,574)         1:A:61:GLU:HB2         1:A:61:GLU:HA<	(1,1376)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:14:TYR:HB2	28	0.36
(1,1376)         1:A:50:VAL:HG13         1:A:14:TYR:HB3         28         0.36           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         18         0.36           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         26         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         20         0.35           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         20         0.35           (1,920)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         4         0.35           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         17         0.35           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         22         0.35           (1,944)         1:A:44:MET:HA         1:A:44:MET:HG2         5         0.35           (1,574)         1:A:61:GLU:HB2         1:A:61:GLU:HA         4         0.35           (1,574)         1:A:61:GLU:HB2         1:A:61:GLU:HA	(1,1376)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:14:TYR:HB3	28	0.36
(1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         18         0.36           (1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         26         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         20         0.35           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         20         0.35           (1,969)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         4         0.35           (1,969)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         4         0.35           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         17         0.35           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         22         0.35           (1,844)         1:A:44:MET:HA         1:A:44:MET:HG2         5         0.35           (1,574)         1:A:61:GLU:HB2         1:A:61:GLU:HA         4         0.35           (1,574)         1:A:61:GLU:HB2         1:A:61:GLU:HA	(1,1376)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:14:TYR:HB2	28	0.36
(1,1142)         1:A:77:ASP:H         1:A:77:ASP:HB3         26         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         20         0.35           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         20         0.35           (1,920)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         4         0.35           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         17         0.35           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         22         0.35           (1,944)         1:A:44:MET:HA         1:A:44:MET:HG2         5         0.35           (1,574)         1:A:61:GLU:HB2         1:A:61:GLU:HA         4         0.35           (1,574)         1:A:61:GLU:HB2         1:A:61:GLU:HA         9         0.35           (1,574)         1:A:61:GLU:HB2         1:A:61:GLU:HA         13         0.35	(1,1376)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:14:TYR:HB3	28	0.36
(1,1039)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,1039)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE21         13         0.36           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG2         20         0.35           (1,969)         1:A:48:LYS:HA         1:A:48:LYS:HG3         20         0.35           (1,920)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         4         0.35           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         17         0.35           (1,916)         1:A:38:PRO:HB2         1:A:38:PRO:HA         22         0.35           (1,844)         1:A:44:MET:HA         1:A:44:MET:HG2         5         0.35           (1,661)         1:A:110:LYS:HB3         1:A:110:LYS:HG2         4         0.35           (1,574)         1:A:61:GLU:HB2         1:A:61:GLU:HA         9         0.35           (1,574)         1:A:61:GLU:HB2         1:A:61:GLU:HA         13         0.35           (1,574)         1:A:61:GLU:HB2         1:A:61:GLU:HA         13         0.35	(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	18	0.36
(1,1039)       1:A:5:VAL:HG12       1:A:71:GLN:HE21       13       0.36         (1,1039)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:71:GLN:HE21       13       0.36         (1,969)       1:A:48:LYS:HA       1:A:48:LYS:HG2       20       0.35         (1,969)       1:A:48:LYS:HA       1:A:48:LYS:HG3       20       0.35         (1,920)       1:A:62:GLY:HA2       1:A:63:PRO:HD2       4       0.35         (1,916)       1:A:38:PRO:HB2       1:A:38:PRO:HA       17       0.35         (1,916)       1:A:38:PRO:HB2       1:A:38:PRO:HA       22       0.35         (1,944)       1:A:44:MET:HA       1:A:44:MET:HG2       5       0.35         (1,661)       1:A:110:LYS:HB3       1:A:110:LYS:HG2       4       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       4       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       9       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       13       0.35	(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	26	0.36
(1,1039)       1:A:5:VAL:HG13       1:A:71:GLN:HE21       13       0.36         (1,969)       1:A:48:LYS:HA       1:A:48:LYS:HG2       20       0.35         (1,969)       1:A:48:LYS:HA       1:A:48:LYS:HG3       20       0.35         (1,920)       1:A:62:GLY:HA2       1:A:63:PRO:HD2       4       0.35         (1,916)       1:A:38:PRO:HB2       1:A:38:PRO:HA       17       0.35         (1,916)       1:A:38:PRO:HB2       1:A:38:PRO:HA       22       0.35         (1,844)       1:A:44:MET:HA       1:A:44:MET:HG2       5       0.35         (1,661)       1:A:110:LYS:HB3       1:A:110:LYS:HG2       4       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       4       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       9       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       13       0.35	(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	13	0.36
(1,969)       1:A:48:LYS:HA       1:A:48:LYS:HG2       20       0.35         (1,969)       1:A:48:LYS:HA       1:A:48:LYS:HG3       20       0.35         (1,920)       1:A:62:GLY:HA2       1:A:63:PRO:HD2       4       0.35         (1,916)       1:A:38:PRO:HB2       1:A:38:PRO:HA       17       0.35         (1,916)       1:A:38:PRO:HB2       1:A:38:PRO:HA       22       0.35         (1,844)       1:A:44:MET:HA       1:A:44:MET:HG2       5       0.35         (1,661)       1:A:110:LYS:HB3       1:A:110:LYS:HG2       4       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       4       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       9       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       13       0.35	(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	13	0.36
(1,969)       1:A:48:LYS:HA       1:A:48:LYS:HG3       20       0.35         (1,920)       1:A:62:GLY:HA2       1:A:63:PRO:HD2       4       0.35         (1,916)       1:A:38:PRO:HB2       1:A:38:PRO:HA       17       0.35         (1,916)       1:A:38:PRO:HB2       1:A:38:PRO:HA       22       0.35         (1,916)       1:A:44:MET:HA       1:A:44:MET:HG2       5       0.35         (1,844)       1:A:44:MET:HA       1:A:44:MET:HG2       5       0.35         (1,661)       1:A:110:LYS:HB3       1:A:110:LYS:HG2       4       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       4       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       9       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       13       0.35	(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	13	0.36
(1,920)       1:A:62:GLY:HA2       1:A:63:PRO:HD2       4       0.35         (1,916)       1:A:38:PRO:HB2       1:A:38:PRO:HA       17       0.35         (1,916)       1:A:38:PRO:HB2       1:A:38:PRO:HA       22       0.35         (1,844)       1:A:44:MET:HA       1:A:44:MET:HG2       5       0.35         (1,661)       1:A:110:LYS:HB3       1:A:110:LYS:HG2       4       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       4       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       9       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       13       0.35	(1,969)	1:A:48:LYS:HA	1:A:48:LYS:HG2	20	0.35
(1,916)       1:A:38:PRO:HB2       1:A:38:PRO:HA       17       0.35         (1,916)       1:A:38:PRO:HB2       1:A:38:PRO:HA       22       0.35         (1,844)       1:A:44:MET:HA       1:A:44:MET:HG2       5       0.35         (1,661)       1:A:110:LYS:HB3       1:A:110:LYS:HG2       4       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       4       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       9       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       13       0.35	(1,969)	1:A:48:LYS:HA	1:A:48:LYS:HG3	20	0.35
(1,916)       1:A:38:PRO:HB2       1:A:38:PRO:HA       22       0.35         (1,844)       1:A:44:MET:HA       1:A:44:MET:HG2       5       0.35         (1,661)       1:A:110:LYS:HB3       1:A:110:LYS:HG2       4       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       4       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       9       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       13       0.35	(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	4	0.35
(1,844)       1:A:44:MET:HA       1:A:44:MET:HG2       5       0.35         (1,661)       1:A:110:LYS:HB3       1:A:110:LYS:HG2       4       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       4       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       9       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       13       0.35	(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	17	0.35
(1,661)       1:A:110:LYS:HB3       1:A:110:LYS:HG2       4       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       4       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       9       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       13       0.35	(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	22	0.35
(1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       4       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       9       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       13       0.35	(1,844)	1:A:44:MET:HA	1:A:44:MET:HG2	5	0.35
(1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       9       0.35         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       13       0.35	(1,661)	1:A:110:LYS:HB3	1:A:110:LYS:HG2	4	0.35
(1,574) 1:A:61:GLU:HB2 1:A:61:GLU:HA 13 0.35	(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	4	0.35
	(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	9	0.35
(1.574) 1.A.61.CI II.HR2 1.A.61.CI II.HA 14 0.25	(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	13	0.35
(1,014)   1.A.01.GLU.IID2   1.A.01.GLU.IIA   14   0.30	(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	14	0.35



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

(1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       23       0.3         (1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       27       0.3         (1,574)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       27       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       3       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       4       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       7       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       8       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       10       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       12       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       14       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       16       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       17       0.3	35 35 35 35 35 35 35 35 35 35
(1,574)       1:A:61:GLU:HB2       1:A:61:GLU:HA       27       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       3       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       4       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       5       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       7       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       8       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       10       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       12       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       14       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       16       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       17       0.3	35 35 35 35 35 35 35 35
(1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       3       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       4       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       5       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       7       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       8       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       10       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       12       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       14       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       16       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       17       0.3	35 35 35 35 35 35 35
(1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       4       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       5       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       7       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       8       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       10       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       12       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       14       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       16       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       17       0.3	35 35 35 35 35 35
(1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       5       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       7       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       8       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       10       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       12       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       14       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       16       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       17       0.3	35 35 35 35 35
(1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       7       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       8       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       10       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       12       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       14       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       16       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       17       0.3	35 35 35 35
(1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       8       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       10       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       12       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       14       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       16       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       17       0.3	35 35 35
(1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       10       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       12       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       14       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       16       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       17       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       17       0.3	35 35
(1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       12       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       14       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       16       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       17       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       17       0.3	35
(1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       14       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       16       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       17       0.3	
(1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       16       0.3         (1,512)       1:A:91:LYS:HB2       1:A:91:LYS:HA       17       0.3	35
(1,512) 1:A:91:LYS:HB2 1:A:91:LYS:HA 17 0.3	
	35
(1 519) 1. A.O1. I.VC. IID9 1. A.O1. I.VC. IIA 10 0.0	35
(1,512)   1:A:91:LYS:HB2   1:A:91:LYS:HA   19   0.3	35
(1,512) 1:A:91:LYS:HB2 1:A:91:LYS:HA 22 0.3	35
(1,512) 1:A:91:LYS:HB2 1:A:91:LYS:HA 24 0.3	35
(1,512) 1:A:91:LYS:HB2 1:A:91:LYS:HA 25 0.3	35
(1,512) 1:A:91:LYS:HB2 1:A:91:LYS:HA 26 0.3	35
(1,512) 1:A:91:LYS:HB2 1:A:91:LYS:HA 27 0.3	35
(1,512) 1:A:91:LYS:HB2 1:A:91:LYS:HA 28 0.3	35
(1,512) 1:A:91:LYS:HB2 1:A:91:LYS:HA 29 0.3	35
(1,512) 1:A:91:LYS:HB2 1:A:91:LYS:HA 30 0.3	35
(1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 28 0.3	35
(1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 28 0.3	35
(1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 28 0.3	35
(1,1602) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:24:ILE:HG12 5 0.3	35
(1,1602) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:24:ILE:HG12 5 0.3	35
(1,1602) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:24:ILE:HG12 5 0.3	35
(1,1602) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:24:ILE:HG12 19 0.3	35
(1,1602) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:24:ILE:HG12 19 0.3	35
(1,1602) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:24:ILE:HG12 19 0.3	35
(1,1602) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:24:ILE:HG12 20 0.3	35
(1,1602) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:24:ILE:HG12 20 0.3	35
(1,1602) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:24:ILE:HG12 20 0.3	35
	35
(1,1602) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:24:ILE:HG12 28 0.3	35
(1,1602) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:24:ILE:HG12 28 0.3	35
(1,1154) 1:A:31:LYS:HA 1:A:31:LYS:HG2 26 0.3	35
(1,969) 1:A:48:LYS:HA 1:A:48:LYS:HG2 19 0.3	34
(1,969) 1:A:48:LYS:HA 1:A:48:LYS:HG3 19 0.3	34
(1,920) 1:A:62:GLY:HA2 1:A:63:PRO:HD2 6 0.3	34
(1,920) 1:A:62:GLY:HA2 1:A:63:PRO:HD2 20 0.3	



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	19	0.34
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	19	0.34
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	19	0.34
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	19	0.34
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	19	0.34
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	19	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	1	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	3	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	5	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	6	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	7	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	8	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	10	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	11	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	12	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	16	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	18	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	19	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	20	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	21	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	22	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	24	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	25	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	26	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	28	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	29	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	30	0.34
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	2	0.34
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	6	0.34
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	9	0.34
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	21	0.34
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	17	0.34
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	17	0.34
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	17	0.34
(1,351)	1:A:27:ASP:HA	1:A:27:ASP:HB2	16	0.34
(1,351)	1:A:27:ASP:HA	1:A:27:ASP:HB2	21	0.34
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	8	0.34
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	8	0.34
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	8	0.34
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	16	0.34
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	16	0.34
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	16	0.34



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	6	0.34
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	6	0.34
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	6	0.34
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	14	0.34
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	2	0.34
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	2	0.34
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	2	0.34
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	7	0.34
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	7	0.34
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	7	0.34
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	26	0.34
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	26	0.34
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	26	0.34
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	29	0.34
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	29	0.34
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	29	0.34
(1,1496)	1:A:82:ARG:H	1:A:69:VAL:HG21	1	0.34
(1,1496)	1:A:82:ARG:H	1:A:69:VAL:HG22	1	0.34
(1,1496)	1:A:82:ARG:H	1:A:69:VAL:HG23	1	0.34
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB2	5	0.34
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB3	5	0.34
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB2	5	0.34
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB3	5	0.34
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB2	5	0.34
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB3	5	0.34
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	29	0.34
(1,1093)	1:A:39:GLU:H	1:A:39:GLU:HB3	7	0.34
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	26	0.33
(1,661)	1:A:110:LYS:HB3	1:A:110:LYS:HG2	26	0.33
(1,661)	1:A:110:LYS:HB3	1:A:110:LYS:HG2	27	0.33
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	2	0.33
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	17	0.33
(1,521)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:103:ARG:HA	13	0.33
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	15	0.33
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	15	0.33
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	15	0.33
(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	2	0.33
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	25	0.33
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	6	0.33
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	6	0.33
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	6	0.33
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	9	0.33



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	9	0.33
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	9	0.33
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	15	0.33
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	15	0.33
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	15	0.33
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	23	0.33
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	23	0.33
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	23	0.33
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	27	0.33
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	27	0.33
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	27	0.33
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	18	0.33
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	18	0.33
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	9	0.33
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	6	0.33
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	6	0.33
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	6	0.33
(1,927)	1:A:27:ASP:H	1:A:27:ASP:HB3	3	0.32
(1,927)	1:A:27:ASP:H	1:A:27:ASP:HB3	11	0.32
(1,927)	1:A:27:ASP:H	1:A:27:ASP:HB3	15	0.32
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	9	0.32
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	16	0.32
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	27	0.32
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	27	0.32
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	27	0.32
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	27	0.32
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	27	0.32
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	27	0.32
(1,69)	1:A:30:GLU:HG2	1:A:30:GLU:HA	19	0.32
(1,655)	1:A:31:LYS:H	1:A:30:GLU:HB2	22	0.32
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	29	0.32
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	29	0.32
(1,169)	1:A:3:PHE:H	1:A:2:GLU:HB2	24	0.32
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	11	0.32
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	11	0.32
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	11	0.32
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	12	0.32
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	12	0.32
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	12	0.32
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	16	0.32
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	16	0.32
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	16	0.32



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

, ,	A:19:VAL:HG21	4 4 04 11 12 11 (4.0		
(1,1602) 1:		1:A:24:ILE:HG12	18	0.32
	A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	18	0.32
(1,1602) 1:	A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	18	0.32
(1,1602) 1:	A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	21	0.32
(1,1602) 1:	A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	21	0.32
(1,1602) 1:	A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	21	0.32
(1,1602) 1:	A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	24	0.32
(1,1602) 1:	A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	24	0.32
(1,1602) 1:	A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	24	0.32
(1,1602) 1:	A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	30	0.32
(1,1602) 1:	A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	30	0.32
(1,1602) 1:	A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	30	0.32
(1,1463) 1	:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD3	3	0.32
(1,1447) 1:	A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HA	6	0.32
(1,1447) 1:	A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HA	6	0.32
(1,1447) 1:	A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HA	6	0.32
(1,1154)	1:A:31:LYS:HA	1:A:31:LYS:HG2	27	0.32
(1,927)	1:A:27:ASP:H	1:A:27:ASP:HB3	8	0.31
(1,927)	1:A:27:ASP:H	1:A:27:ASP:HB3	14	0.31
(1,655)	1:A:31:LYS:H	1:A:30:GLU:HB2	9	0.31
(1,509) 1	:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	25	0.31
(1,509) 1	:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	25	0.31
(1,509) 1	:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	25	0.31
(1,1602) 1:	A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	1	0.31
(1,1602) 1:	A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	1	0.31
(1,1602) 1:	A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	1	0.31
(1,1602) 1:	A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	3	0.31
(1,1602) 1:	A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	3	0.31
(1,1602) 1:	A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	3	0.31
(1,1602) 1:	A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	14	0.31
(1,1602) 1:	A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	14	0.31
(1,1602) 1:	A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	14	0.31
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	20	0.31
(1,1154)	1:A:31:LYS:HA	1:A:31:LYS:HG2	28	0.31
(1,997) 1	l:A:12:GLN:HA	1:A:12:GLN:HG3	29	0.3
(1,99) 1	:A:84:GLU:HB2	1:A:81:VAL:HA	15	0.3
(1,99) 1	:A:84:GLU:HB3	1:A:81:VAL:HA	15	0.3
(1,969)	1:A:48:LYS:HA	1:A:48:LYS:HG2	15	0.3
(1,969)	1:A:48:LYS:HA	1:A:48:LYS:HG3	15	0.3
(1,927)	1:A:27:ASP:H	1:A:27:ASP:HB3	7	0.3
(1,927)	1:A:27:ASP:H	1:A:27:ASP:HB3	16	0.3
(1,920) 1	:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	1	0.3



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,660)	1:A:44:MET:HE1	1:A:39:GLU:HG2	7	0.3
(1,660)	1:A:44:MET:HE2	1:A:39:GLU:HG2	7	0.3
(1,660)	1:A:44:MET:HE3	1:A:39:GLU:HG2	7	0.3
(1,660)	1:A:44:MET:HE1	1:A:39:GLU:HG3	7	0.3
(1,660)	1:A:44:MET:HE2	1:A:39:GLU:HG3	7	0.3
(1,660)	1:A:44:MET:HE3	1:A:39:GLU:HG3	7	0.3
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	25	0.3
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	25	0.3
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	25	0.3
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	1	0.3
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	1	0.3
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	1	0.3
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	8	0.3
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	8	0.3
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	8	0.3
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	13	0.3
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	13	0.3
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	13	0.3
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	25	0.3
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	25	0.3
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	25	0.3
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:54:MET:HG3	18	0.3
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:54:MET:HG3	18	0.3
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:54:MET:HG3	18	0.3
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:14:TYR:HB2	18	0.3
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:14:TYR:HB3	18	0.3
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:14:TYR:HB2	18	0.3
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:14:TYR:HB3	18	0.3
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:14:TYR:HB2	18	0.3
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:14:TYR:HB3	18	0.3
(1,1233)	1:A:14:TYR:HD1	1:A:54:MET:HG3	20	0.3
(1,1233)	1:A:14:TYR:HD2	1:A:54:MET:HG3	20	0.3
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	5	0.3
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	5	0.3
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	5	0.3
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	20	0.3
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	20	0.3
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	20	0.3
(1,927)	1:A:27:ASP:H	1:A:27:ASP:HB3	21	0.29
(1,823)	1:A:110:LYS:HG2	1:A:110:LYS:HE2	14	0.29
(1,823)	1:A:110:LYS:HG2	1:A:110:LYS:HE3	14	0.29
(1,729)	1:A:91:LYS:H	1:A:91:LYS:HG3	1	0.29



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,69)	1:A:30:GLU:HG2	1:A:30:GLU:HA	9	0.29
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	1	0.29
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	15	0.29
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	15	0.29
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	15	0.29
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	10	0.29
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	10	0.29
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	10	0.29
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	17	0.29
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	17	0.29
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	17	0.29
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	22	0.29
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	22	0.29
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	22	0.29
(1,1408)	1:A:16:THR:HG21	1:A:19:VAL:HB	26	0.29
(1,1408)	1:A:16:THR:HG22	1:A:19:VAL:HB	26	0.29
(1,1408)	1:A:16:THR:HG23	1:A:19:VAL:HB	26	0.29
(1,1408)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HG3	26	0.29
(1,1408)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HG3	26	0.29
(1,1408)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HG3	26	0.29
(1,1408)	1:A:16:THR:HG21	1:A:19:VAL:HB	27	0.29
(1,1408)	1:A:16:THR:HG22	1:A:19:VAL:HB	27	0.29
(1,1408)	1:A:16:THR:HG23	1:A:19:VAL:HB	27	0.29
(1,1408)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HG3	27	0.29
(1,1408)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HG3	27	0.29
(1,1408)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HG3	27	0.29
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	4	0.29
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	4	0.29
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	4	0.29
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	21	0.29
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	21	0.29
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	21	0.29
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	23	0.29
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	23	0.29
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	23	0.29
(1,1154)	1:A:31:LYS:HA	1:A:31:LYS:HG2	24	0.29
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	1	0.29
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	1	0.29
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	1	0.29
(1,194)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:6:SER:HB2	2	0.28
(1,194)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:6:SER:HB2	2	0.28
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	8	0.28



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

(1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         1:A:36:GLU:HB3         1:A:36:GLU:HB3         0.28           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         13         0.28           (1,1553)         1:A:8:THR:HA         1:A:20:ILE:HD11         20         0.28           (1,1553)         1:A:8:THR:HA         1:A:120:ILE:HD12         20         0.28           (1,1447)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HA         12         0.28           (1,1447)         1:A:16:THR:HG22         1:A:17:GLU:HA         12         0.28           (1,1447)         1:A:16:THR:HG23         1:A:17:GLU:HA         12         0.28           (1,1366)         1:A:36:SPVAL:HA         1:A:23:ASP:HB3         28         0.27           (1,937)         1:A:13:ASP:H         1:A:123:ASP:HB3         30         0.27           (1,720)	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         13         0.28           (1,1553)         1:A:8:THR:HA         1:A:120:ILE:HD11         20         0.28           (1,1553)         1:A:8:THR:HA         1:A:120:ILE:HD12         20         0.28           (1,1553)         1:A:8:THR:HA         1:A:120:ILE:HD13         20         0.28           (1,1447)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HA         12         0.28           (1,1447)         1:A:16:THR:HG23         1:A:17:GLU:HA         12         0.28           (1,1447)         1:A:16:THR:HG23         1:A:17:GLU:HA         12         0.28           (1,1447)         1:A:16:THR:HG23         1:A:17:GLU:HA         12         0.28           (1,1366)         1:A:88:VAL:HA         1:A:23:ASP:HB         12         0.28           (1,370)         1:A:123:ASP:H         1:A:123:ASP:HB3         28         0.27           (1,709)         1:A:91:LYS:H         1:A:91:LYS:HG3         23         0.27           (1,700)         1:A:18:CYS:HA         1:A:21:SER:HB3         6         0.27           (1,512)         1:A:19:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         11         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG	(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	8	0.28
(1,1553) 1:A:8:THR:HA 1:A:120:ILE:HD11 20 0.28 (1,1553) 1:A:8:THR:HA 1:A:120:ILE:HD12 20 0.28 (1,1553) 1:A:8:THR:HA 1:A:120:ILE:HD13 20 0.28 (1,1447) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 12 0.28 (1,1447) 1:A:16:THR:HG22 1:A:17:GLU:HA 12 0.28 (1,1447) 1:A:16:THR:HG22 1:A:17:GLU:HA 12 0.28 (1,1447) 1:A:16:THR:HG23 1:A:17:GLU:HA 12 0.28 (1,1366) 1:A:89:VAL:HA 1:A:63:PRO:HG3 11 0.28 (1,937) 1:A:123:ASP:H 1:A:123:ASP:HB3 28 0.27 (1,937) 1:A:123:ASP:H 1:A:123:ASP:HB3 28 0.27 (1,709) 1:A:123:ASP:H 1:A:123:ASP:HB3 30 0.27 (1,700) 1:A:18:CYS:HA 1:A:21:SER:HB2 6 0.27 (1,70) 1:A:18:CYS:HA 1:A:21:SER:HB3 6 0.27 (1,501) 1:A:106:IVS:HB2 1:A:103:ARG:HA 16 0.27 (1,509) 1:A:91:IVS:HB3 1:A:93:THR:HG21 11 0.27 (1,509) 1:A:91:IVS:HB3 1:A:93:THR:HG21 11 0.27 (1,509) 1:A:91:IVS:HB3 1:A:93:THR:HG21 11 0.27 (1,449) 1:A:4:THR:HA 1:A:4:THR:HG21 28 0.27 (1,449) 1:A:4:THR:HA 1:A:4:THR:HG21 28 0.27 (1,449) 1:A:4:THR:HA 1:A:4:THR:HG22 28 0.27 (1,449) 1:A:4:THR:HA 1:A:4:THR:HG22 28 0.27 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:13:ARG:H 1:A:13:ARG:HB3 1 0.27 (1,419) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:13:GLV:HB3 1 1.3:0:CY (1,410) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLV:HG3 13 0.27 (1,1587) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLV:HG3 13 0.27 (1,1587) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLV:HG3 13 0.27 (1,1587) 1:A:3:US:HB3 1:A:106:LYS:HB3 1 1.3:106:LYS:HB3 1 1.3:0:CY (1,1587) 1:A:3:US:HB3 1 1.3:106:LYS:HB3 1 1.3:0:CY (1,1587) 1:A:3:US:HB3 1 1.3:106:LYS:HB3 1 1.3:0:CY (1,1417) 1:A:15:VAL:HG13 1:A:71:GLV:HB3 1 3 0.27 (1,1417) 1:A:16:THR:HG21 1:A:71:GLV:HB 16 0.27 (1,1417) 1:A:16:THR:HG21 1:A:71:GLV:HB 16 0.27 (1,1417) 1:A:16:THR:HG22 1:A:71:GLV:HA 16 0.27 (1,1417) 1:A:16:THR:HG22 1:A:71:GLV:HA 16 0.27 (1,1417) 1:A:16:THR:HG22 1:A:71:GLV:HA 16 0.27 (1,1418) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 16 0.27 (1,1418) 1:A:16:THR:HG22 1:A:17:GLU:HB 13 0.27 (1,1418) 1:A:16:THR:HG22 1:A:17:GLU:HG 13 0.27 (1,1418) 1:A:16:THR:HG22 1:A:17:GLU:HG 13 0.27 (1,1418) 1:A:16:THR:HG22 1:A:17:GLU:HG 13 0.27 (1,141	(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	13	0.28
(1,1553) 1:A:8:THR:HA	(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	13	0.28
(1,1553)         1:A:8:THR:HA         1:A:120:ILE:HD13         20         0.28           (1,1447)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HA         12         0.28           (1,1447)         1:A:16:THR:HG22         1:A:17:GLU:HA         12         0.28           (1,1447)         1:A:16:THR:HG23         1:A:17:GLU:HA         12         0.28           (1,1447)         1:A:16:THR:HG23         1:A:17:GLU:HA         12         0.28           (1,1447)         1:A:16:THR:HG23         1:A:17:GLU:HA         12         0.28           (1,1366)         1:A:8:QVAL:HA         1:A:23:ASP:HB3         11         0.28           (1,937)         1:A:123:ASP:H         1:A:123:ASP:HB3         28         0.27           (1,709)         1:A:91:LYS:H         1:A:91:DYS:HG3         23         0.27           (1,70)         1:A:18:CYS:HA         1:A:21:SER:HB3         6         0.27           (1,501)         1:A:19:LYS:HB3         1:A:21:SER:HB3         6         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         11         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         11         0.27           (1,549)         1:A:4HR:HA         1:A:4:THR:HG23 <td>(1,1553)</td> <td>1:A:8:THR:HA</td> <td>1:A:120:ILE:HD11</td> <td>20</td> <td>0.28</td>	(1,1553)	1:A:8:THR:HA	1:A:120:ILE:HD11	20	0.28
(1,1447) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 12 0.28 (1,1447) 1:A:16:THR:HG22 1:A:17:GLU:HA 12 0.28 (1,1447) 1:A:16:THR:HG23 1:A:17:GLU:HA 12 0.28 (1,1467) 1:A:16:THR:HG23 1:A:17:GLU:HA 12 0.28 (1,1366) 1:A:89:VAL:HA 1:A:63:PRO:HG3 11 0.28 (1,937) 1:A:123:ASP:H 1:A:123:ASP:HB3 28 0.27 (1,937) 1:A:123:ASP:H 1:A:123:ASP:HB3 30 0.27 (1,729) 1:A:91:LYS:H 1:A:91:LYS:HG3 23 0.27 (1,700) 1:A:18:CYS:HA 1:A:21:SER:HB3 6 0.27 (1,501) 1:A:16:CYS:HA 1:A:21:SER:HB3 6 0.27 (1,501) 1:A:16:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 11 0.27 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 11 0.27 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 11 0.27 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 11 0.27 (1,449) 1:A:4:THR:HA 1:A:4:THR:HG21 28 0.27 (1,449) 1:A:4:THR:HA 1:A:4:THR:HG21 28 0.27 (1,449) 1:A:4:THR:HA 1:A:4:THR:HG22 28 0.27 (1,449) 1:A:5-VAL:HG11 1:A:16:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HB3 1:A:06:LYS:HG3 13 0.27 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 4 0.27 (1,207) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE22 4 0.27 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:71:GLN:HE22 4 0.27 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:71:GLN:HE22 4 0.27 (1,1447) 1:A:16:THR:HG21 1:A:71:GLN:HE22 4 0.27 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:71:GLN:HE22 4 0.27 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:71:GLN:HE22 4 0.27 (1,1447) 1:A:16:THR:HG21 1:A:71:GLN:HE22 1 0.27 (1,1447) 1:A:16:THR:HG21 1:A:71:GLN:HE22 1 0.27 (1,1447) 1:A:16:THR:HG21 1:A:71:GLN:HE22 1 0.27 (1,1447) 1:A:16:THR:HG21 1:A:71:GLN:HE23 1 0.27 (1,1447) 1:A:16:THR:HG21 1:A:71:GLN:HE23 1 0.27 (1,1448) 1:A:16:THR:HG21 1:A:71:GLN:HB3 1 0.27 (1,1449) 1:A:16:THR:HG21 1:A:71:GLN:HB3 1 0.27 (1,1448) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 16 0.27 (1,1447) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 16 0.27 (1,1448) 1:A:16:THR:HG22 1:A:17:GLU:HA 16 0.27 (1,1448) 1:A:16:THR:HG23 1:A:19:VAL:HB 13 0.27 (1,1408) 1:A:16:THR:HG22 1:A:17:GLU:HG3 13 0.27 (1,1408) 1:A:16:THR:HG23 1:A:19:VAL:HB 13 0.27 (1,1408) 1:A:16:THR:HG23 1:A:19:VAL:HB 13 0.27 (1,1408	(1,1553)	1:A:8:THR:HA	1:A:120:ILE:HD12	20	0.28
(1,1447) 1:A:16:THR:HG22 1:A:17:GLU:HA 12 0.28 (1,1447) 1:A:16:THR:HG23 1:A:17:GLU:HA 12 0.28 (1,1366) 1:A:89:VAL:HA 1:A:63:PRO:HG3 11 0.28 (1,937) 1:A:123:ASP:H 1:A:123:ASP:HB3 28 0.27 (1,937) 1:A:123:ASP:H 1:A:123:ASP:HB3 28 0.27 (1,037) 1:A:123:ASP:H 1:A:123:ASP:HB3 30 0.27 (1,709) 1:A:18:CYS:HA 1:A:12:SER:HB2 6 0.27 (1,70) 1:A:18:CYS:HA 1:A:21:SER:HB2 6 0.27 (1,501) 1:A:106:LYS:HB2 1:A:103:ARG:HA 16 0.27 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 11 0.27 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 11 0.27 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 11 0.27 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 11 0.27 (1,449) 1:A:4:THR:HA 1:A:4:THR:HG21 28 0.27 (1,449) 1:A:4:THR:HA 1:A:4:THR:HG21 28 0.27 (1,449) 1:A:4:THR:HA 1:A:4:THR:HG22 28 0.27 (1,449) 1:A:4:THR:HA 1:A:4:THR:HG23 28 0.27 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 4 0.27 (1,207) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE22 4 0.27 (1,207) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE22 4 0.27 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 23 0.27 (1,1447) 1:A:16:THR:HG21 1:A:71:GLN:HE22 4 0.27 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:36:GLU:HB3 1:A:36:GLU:HB3 1:A:36:GLU:HB3 1:A:36:GLU:HB3 1:A:16:THR:HG21 1:A:71:GLN:HE22 4 0.27 (1,1447) 1:A:16:THR:HG21 1:A:71:GLN:HE22 4 0.27 (1,1447) 1:A:16:THR:HG21 1:A:71:GLN:HE22 1 0.27 (1,1448) 1:A:16:THR:HG21 1:A:71:GLN:HE22 1 0.27 (1,1448) 1:A:16:THR:HG21 1:A:71:GLN:HE22 1 0.27 (1,1448) 1:A:16:THR:HG21 1:A:71:GLN:HB 13 0.27 (1,1448) 1:A:16:THR:HG21 1:A:71:GLU:HA 16 0.27 (1,1448) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 16 0.27 (1,1448) 1:A:16:THR:HG21 1:A:19:VAL:HB 13 0.27 (1,1408) 1:A:16:THR:HG22 1:A:19:VAL:HB 13 0.27 (1,1408) 1:A:16:THR:HG21 1:A:19:VAL:HB 13 0.27 (1,1408) 1:A:16:THR:HG22 1:A:19:VAL:HB 13 0.27 (1,1408) 1:A:16:THR:HG22 1:A:19:VAL:HB 13 0.27 (1,1408) 1	(1,1553)	1:A:8:THR:HA	1:A:120:ILE:HD13	20	0.28
(1,1447) 1:A:16:THR:HG23 1:A:17:GLU:HA 12 0.28 (1,1366) 1:A:89:VAL:HA 1:A:63:PRO:HG3 11 0.28 (1,937) 1:A:123:ASP:H 1:A:123:ASP:HB3 28 0.27 (1,937) 1:A:123:ASP:H 1:A:123:ASP:HB3 30 0.27 (1,729) 1:A:91:LYS:H 1:A:91:LYS:HG3 23 0.27 (1,70) 1:A:18:CYS:HA 1:A:21:SER:HB2 6 0.27 (1,70) 1:A:18:CYS:HA 1:A:21:SER:HB2 6 0.27 (1,70) 1:A:18:CYS:HA 1:A:21:SER:HB3 6 0.27 (1,501) 1:A:106:LYS:HB2 1:A:103:ARG:HA 16 0.27 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 11 0.27 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 11 0.27 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 11 0.27 (1,471) 1:A:13:ARG:H 1:A:13:ARG:HB3 1 0.27 (1,449) 1:A:4:THR:HA 1:A:4:THR:HG21 28 0.27 (1,449) 1:A:4:THR:HA 1:A:4:THR:HG21 28 0.27 (1,449) 1:A:4:THR:HA 1:A:4:THR:HG23 28 0.27 (1,409) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:106:LYS:HG3 13 0.27 (1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 4 0.27 (1,207) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE22 4 0.27 (1,207) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE22 4 0.27 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:16:GLU:HB3 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 16 0.27 (1,1447) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 16 0.27 (1,1448) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 16 0.27 (1,1449) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 16 0.27 (1,1440) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 16 0.27 (1,1447) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 16 0.27 (1,1448) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 16 0.27 (1,1449) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 16 0.27 (1,1448) 1:A:16:THR:HG22 1:A:19:VAL:HB 13 0.27 (1,1408) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 16 0.27 (1,1408) 1:A:16:THR:HG22 1:A:19:VAL:HB 13 0.27 (1,1408) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 16 0.27 (1,1408) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 16 0.27 (1,1408) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 16 0.27 (1,1408) 1:A:16:THR:HG22 1:A:19:VAL:HB 13 0.27 (1,1408) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HG3 13 0.27 (1,1408) 1:A:16:THR:HG22 1:A:19:VAL:HB 13 0.27 (1,1408) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HG3 13 0.27 (1,1408) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HG3 13 0.27 (1,1408) 1:A:16:THR:HG21 1	(1,1447)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HA	12	0.28
(1,1366)         1:A:89:VAL:HA         1:A:63:PRO:HG3         11         0.28           (1,937)         1:A:123:ASP:H         1:A:123:ASP:HB3         28         0.27           (1,937)         1:A:123:ASP:H         1:A:123:ASP:HB3         30         0.27           (1,729)         1:A:91:LYS:H         1:A:91:LYS:HG3         23         0.27           (1,70)         1:A:18:CYS:HA         1:A:21:SER:HB2         6         0.27           (1,501)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:103:ARG:HA         16         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         11         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         11         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         11         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         11         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         11         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         11         0.27           (1,420)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:TR:HCB22         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG21 <td>(1,1447)</td> <td>1:A:16:THR:HG22</td> <td>1:A:17:GLU:HA</td> <td>12</td> <td>0.28</td>	(1,1447)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HA	12	0.28
(1,937)         1:A:123:ASP:H         1:A:123:ASP:HB3         28         0.27           (1,937)         1:A:123:ASP:H         1:A:123:ASP:HB3         30         0.27           (1,729)         1:A:91:LYS:H         1:A:91:LYS:HG3         23         0.27           (1,70)         1:A:18:CYS:HA         1:A:21:SER:HB2         6         0.27           (1,70)         1:A:18:CYS:HB         1:A:103:ARG:HA         16         0.27           (1,501)         1:A:91:LYS:HB2         1:A:103:ARG:HA         16         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         11         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         11         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         11         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         11         0.27           (1,447)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG21         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG22         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:106:LYS:HG3         13         0.27           (1,449)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:106:LYS:HG3	(1,1447)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HA	12	0.28
(1,937)         1:A:123:ASP:H         1:A:123:ASP:HB3         30         0.27           (1,729)         1:A:91:LYS:H         1:A:91:LYS:HG3         23         0.27           (1,70)         1:A:18:CYS:HA         1:A:21:SER:HB2         6         0.27           (1,70)         1:A:18:CYS:HA         1:A:21:SER:HB3         6         0.27           (1,521)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:103:ARG:HA         16         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         11         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         11         0.27           (1,471)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB3         1         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG21         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG23         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG23         28         0.27           (1,449)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         <	(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	11	0.28
(1,729)         1:A:91:LYS:H         1:A:91:LYS:HG3         23         0.27           (1,70)         1:A:18:CYS:HA         1:A:21:SER:HB2         6         0.27           (1,70)         1:A:18:CYS:HA         1:A:21:SER:HB3         6         0.27           (1,521)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:103:ARG:HA         16         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         11         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         11         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         11         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         11         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:43:ARG:HB3         1         0.27           (1,471)         1:A:31:ARG:HB         1:A:13:ARG:HB3         1         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG21         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG23         28         0.27           (1,410)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22	(1,937)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB3	28	0.27
(1,70)         1:A:18:CYS:HA         1:A:21:SER:HB2         6         0.27           (1,70)         1:A:18:CYS:HA         1:A:21:SER:HB3         6         0.27           (1,521)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:103:ARG:HA         16         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         11         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         11         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         11         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         11         0.27           (1,471)         1:A:3:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB3         1         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG21         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG22         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG23         28         0.27           (1,449)         1:A:3:06:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HG3         13         0.27           (1,420)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22	(1,937)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB3	30	0.27
(1,70)         1:A:18:CYS:HA         1:A:21:SER:HB3         6         0.27           (1,521)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:103:ARG:HA         16         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         11         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         11         0.27           (1,471)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB3         1         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG21         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG22         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG23         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG23         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG23         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:106:LYS:HG3         13         0.27           (1,412)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HG3         13         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22	(1,729)	1:A:91:LYS:H	1:A:91:LYS:HG3	23	0.27
(1,70)         1:A:18:CYS:HA         1:A:21:SER:HB3         6         0.27           (1,521)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:103:ARG:HA         16         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         11         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         11         0.27           (1,471)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB3         1         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG21         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG22         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG23         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG23         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:16:LYS:HG3         13         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:16:LYS:HG3         13         0.27           (1,412)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HG3         13         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22	(1,70)	1:A:18:CYS:HA	1:A:21:SER:HB2	6	0.27
(1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         11         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         11         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         11         0.27           (1,471)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB3         1         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG21         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG23         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG23         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG23         28         0.27           (1,412)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HG3         13         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,207)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:31:LYS:HA         1:A:38:PRO:HD2         23         0.27           (1,1587)         1:A:36:GHB:HB3         1:A:17:GLU:HB3         23         0.27           (1,1447)         1:A:16:THR:HG21	(1,70)	1:A:18:CYS:HA	1:A:21:SER:HB3	6	0.27
(1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         11         0.27           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         11         0.27           (1,471)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB3         1         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG21         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG23         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG23         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG23         28         0.27           (1,412)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HG3         13         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,207)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         23         0.27           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:36:GLU:HB3         23         0.27           (1,1587)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HA         16         0.27           (1,1447)         1:A:16:THR:HG23         1:A:17:GLU:HB	(1,521)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:103:ARG:HA	16	0.27
(1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         11         0.27           (1,471)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB3         1         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG21         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG22         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG23         28         0.27           (1,412)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HG3         13         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         23         0.27           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:17:GLU:HB3         23         0.27           (1,1447)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HA         16         0.27           (1,1447)         1:A:16:THR:HG23         1:A:19:VAL:HB	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	11	0.27
(1,471)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB3         1         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG21         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG22         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG23         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG23         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG23         28         0.27           (1,412)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HG3         13         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         23         0.27           (1,1447)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HA         16         0.27           (1,1447)         1:A:16:THR:HG23         1:A:19:VAL:HB	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	11	0.27
(1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG21         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG22         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG23         28         0.27           (1,449)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HG3         13         0.27           (1,412)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HG3         13         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,207)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         23         0.27           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         23         0.27           (1,1447)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HA         16         0.27           (1,1447)         1:A:16:THR:HG23         1:A:17:GLU:HA         16         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG21         1:A:19:VAL:HB         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG23         1:A:17:GLU:H	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	11	0.27
(1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG22         28         0.27           (1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG23         28         0.27           (1,412)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HG3         13         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         23         0.27           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         23         0.27           (1,1447)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HA         16         0.27           (1,1447)         1:A:16:THR:HG22         1:A:17:GLU:HA         16         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG21         1:A:19:VAL:HB         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG22         1:A:19:VAL:HB         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HG3         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG22         1:A:17:GL	(1,471)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HB3	1	0.27
(1,449)         1:A:4:THR:HA         1:A:4:THR:HG23         28         0.27           (1,412)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HG3         13         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         23         0.27           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         23         0.27           (1,1447)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HA         16         0.27           (1,1447)         1:A:16:THR:HG22         1:A:17:GLU:HA         16         0.27           (1,1447)         1:A:16:THR:HG23         1:A:19:VAL:HB         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG21         1:A:19:VAL:HB         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG23         1:A:17:GLU:HG3         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG23         1:A:17:GLU:HG3         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG23         1:A:1	(1,449)	1:A:4:THR:HA	1:A:4:THR:HG21	28	0.27
(1,412)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HG3         13         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         23         0.27           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         23         0.27           (1,1447)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HA         16         0.27           (1,1447)         1:A:16:THR:HG22         1:A:17:GLU:HA         16         0.27           (1,1447)         1:A:16:THR:HG23         1:A:19:VAL:HB         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG21         1:A:19:VAL:HB         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG23         1:A:17:GLU:HG3         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HG3         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG23         1:A:17:GLU:HG3         13         0.27           (1,1408)         1:A:38:PRO:HD2         1:	(1,449)	1:A:4:THR:HA	1:A:4:THR:HG22	28	0.27
(1,207)         1:A:5:VAL:HG11         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         23         0.27           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         23         0.27           (1,1447)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HA         16         0.27           (1,1447)         1:A:16:THR:HG22         1:A:17:GLU:HA         16         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG23         1:A:19:VAL:HB         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG21         1:A:19:VAL:HB         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG23         1:A:17:GLU:HG3         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HG3         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG22         1:A:17:GLU:HG3         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG23         1:A:17:GLU:HG3         13         0.27           (1,1408)         1:A:36:THR:HG23         1	(1,449)	1:A:4:THR:HA	1:A:4:THR:HG23	28	0.27
(1,207)         1:A:5:VAL:HG12         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         23         0.27           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         23         0.27           (1,1447)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HA         16         0.27           (1,1447)         1:A:16:THR:HG22         1:A:17:GLU:HA         16         0.27           (1,1448)         1:A:16:THR:HG23         1:A:19:VAL:HB         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG22         1:A:19:VAL:HB         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG23         1:A:19:VAL:HB         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HG3         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG22         1:A:17:GLU:HG3         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG23         1:A:17:GLU:HG3         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG23         1:A:17:GLU:HG3         13         0.27           (1,1408)         1:A:38:PRO:HD2         1	(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	13	0.27
(1,207)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:71:GLN:HE22         4         0.27           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         23         0.27           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         23         0.27           (1,1447)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HA         16         0.27           (1,1447)         1:A:16:THR:HG22         1:A:17:GLU:HA         16         0.27           (1,1447)         1:A:16:THR:HG23         1:A:19:VAL:HB         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG21         1:A:19:VAL:HB         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG22         1:A:19:VAL:HB         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG23         1:A:17:GLU:HG3         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HG3         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG23         1:A:17:GLU:HG3         13         0.27           (1,1408)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD2         26         0.27           (1,1408)         1:A:39:VAL:HG11         29         0.27           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG12         2	(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	4	0.27
(1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         23         0.27           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         23         0.27           (1,1447)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HA         16         0.27           (1,1447)         1:A:16:THR:HG22         1:A:17:GLU:HA         16         0.27           (1,1447)         1:A:16:THR:HG23         1:A:17:GLU:HA         16         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG21         1:A:19:VAL:HB         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG22         1:A:19:VAL:HB         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG23         1:A:17:GLU:HG3         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HG3         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG23	(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	4	0.27
(1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         23         0.27           (1,1447)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HA         16         0.27           (1,1447)         1:A:16:THR:HG22         1:A:17:GLU:HA         16         0.27           (1,1447)         1:A:16:THR:HG23         1:A:19:VAL:HB         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG21         1:A:19:VAL:HB         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG23         1:A:19:VAL:HB         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG23         1:A:17:GLU:HG3         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG22         1:A:17:GLU:HG3         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG23         1:A:17:GLU:HG3         13         0.27           (1,1408)         1:A:16:THR:HG23         1:A:17:GLU:HG3         13         0.27           (1,1408)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD2         26         0.27           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG11         29         0.27           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG12         29         0.27	(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	4	0.27
(1,1447)       1:A:16:THR:HG21       1:A:17:GLU:HA       16       0.27         (1,1447)       1:A:16:THR:HG22       1:A:17:GLU:HA       16       0.27         (1,1447)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HA       16       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG21       1:A:19:VAL:HB       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG22       1:A:19:VAL:HB       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HG3       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG22       1:A:17:GLU:HG3       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG22       1:A:17:GLU:HG3       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HG3       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HG3       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HG3       13       0.27         (1,1178)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD2       26       0.27         (1,1178)       1:A:90:ASP:H       1:A:89:VAL:HG11       29       0.27         (1,1178)       1:A:90:ASP:H       1:A:89:VAL:HG12       29       0.27	(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	23	0.27
(1,1447)       1:A:16:THR:HG22       1:A:17:GLU:HA       16       0.27         (1,1447)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HA       16       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG21       1:A:19:VAL:HB       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG22       1:A:19:VAL:HB       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG23       1:A:19:VAL:HB       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG21       1:A:17:GLU:HG3       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG22       1:A:17:GLU:HG3       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HG3       13       0.27         (1,1408)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD2       26       0.27         (1,1178)       1:A:90:ASP:H       1:A:89:VAL:HG11       29       0.27         (1,1178)       1:A:90:ASP:H       1:A:89:VAL:HG12       29       0.27	(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	23	0.27
(1,1447)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HA       16       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG21       1:A:19:VAL:HB       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG22       1:A:19:VAL:HB       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG23       1:A:19:VAL:HB       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG21       1:A:17:GLU:HG3       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG22       1:A:17:GLU:HG3       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HG3       13       0.27         (1,1393)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD2       26       0.27         (1,1178)       1:A:90:ASP:H       1:A:89:VAL:HG11       29       0.27         (1,1178)       1:A:90:ASP:H       1:A:89:VAL:HG12       29       0.27	(1,1447)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HA	16	0.27
(1,1408)       1:A:16:THR:HG21       1:A:19:VAL:HB       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG22       1:A:19:VAL:HB       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG23       1:A:19:VAL:HB       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG21       1:A:17:GLU:HG3       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG22       1:A:17:GLU:HG3       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HG3       13       0.27         (1,1408)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD2       26       0.27         (1,1393)       1:A:39:ASP:H       1:A:89:VAL:HG11       29       0.27         (1,1178)       1:A:90:ASP:H       1:A:89:VAL:HG12       29       0.27	(1,1447)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HA	16	0.27
(1,1408)       1:A:16:THR:HG22       1:A:19:VAL:HB       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG23       1:A:19:VAL:HB       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG21       1:A:17:GLU:HG3       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG22       1:A:17:GLU:HG3       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HG3       13       0.27         (1,1393)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD2       26       0.27         (1,1178)       1:A:90:ASP:H       1:A:89:VAL:HG11       29       0.27         (1,1178)       1:A:90:ASP:H       1:A:89:VAL:HG12       29       0.27	(1,1447)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HA	16	0.27
(1,1408)       1:A:16:THR:HG23       1:A:19:VAL:HB       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG21       1:A:17:GLU:HG3       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG22       1:A:17:GLU:HG3       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HG3       13       0.27         (1,1408)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD2       26       0.27         (1,1393)       1:A:90:ASP:H       1:A:89:VAL:HG11       29       0.27         (1,1178)       1:A:90:ASP:H       1:A:89:VAL:HG12       29       0.27	(1,1408)	1:A:16:THR:HG21	1:A:19:VAL:HB	13	0.27
(1,1408)       1:A:16:THR:HG21       1:A:17:GLU:HG3       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG22       1:A:17:GLU:HG3       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HG3       13       0.27         (1,1393)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD2       26       0.27         (1,1178)       1:A:90:ASP:H       1:A:89:VAL:HG11       29       0.27         (1,1178)       1:A:90:ASP:H       1:A:89:VAL:HG12       29       0.27	(1,1408)	1:A:16:THR:HG22	1:A:19:VAL:HB	13	0.27
(1,1408)       1:A:16:THR:HG22       1:A:17:GLU:HG3       13       0.27         (1,1408)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HG3       13       0.27         (1,1393)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD2       26       0.27         (1,1178)       1:A:90:ASP:H       1:A:89:VAL:HG11       29       0.27         (1,1178)       1:A:90:ASP:H       1:A:89:VAL:HG12       29       0.27	(1,1408)	1:A:16:THR:HG23	1:A:19:VAL:HB	13	0.27
(1,1408)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HG3       13       0.27         (1,1393)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD2       26       0.27         (1,1178)       1:A:90:ASP:H       1:A:89:VAL:HG11       29       0.27         (1,1178)       1:A:90:ASP:H       1:A:89:VAL:HG12       29       0.27	, ,	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HG3	13	0.27
(1,1393)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD2       26       0.27         (1,1178)       1:A:90:ASP:H       1:A:89:VAL:HG11       29       0.27         (1,1178)       1:A:90:ASP:H       1:A:89:VAL:HG12       29       0.27	(1,1408)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HG3	13	0.27
(1,1178)       1:A:90:ASP:H       1:A:89:VAL:HG11       29       0.27         (1,1178)       1:A:90:ASP:H       1:A:89:VAL:HG12       29       0.27	(1,1408)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HG3	13	0.27
(1,1178) 1:A:90:ASP:H 1:A:89:VAL:HG12 29 0.27	(1,1393)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD2	26	0.27
	(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	29	0.27
(1 1178) 1.A.OO.A CD.H 1.A.OO.VAT.HC12 20 0.27	(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	29	0.27
(1,1110) $[1.A.90.ASI.II]$ $[1.A.99.VAL.IIGI3]$ 29 $[0.21]$	(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	29	0.27



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,521)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:103:ARG:HA	24	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	1	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	2	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	3	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	4	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	5	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	6	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	7	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	8	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	9	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	10	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	11	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	12	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	14	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	16	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	17	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	18	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	20	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	21	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	22	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	23	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	24	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	25	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	29	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	30	0.26
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	4	0.26
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	9	0.26
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	22	0.26
(1,997)	1:A:12:GLN:HA	1:A:12:GLN:HG3	18	0.25
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	30	0.25
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD21	14	0.25
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD22	14	0.25
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD23	14	0.25
(1,69)	1:A:30:GLU:HG2	1:A:30:GLU:HA	22	0.25
(1,655)	1:A:31:LYS:H	1:A:30:GLU:HB2	19	0.25
(1,471)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HB3	8	0.25
(1,471)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HB3	25	0.25
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	26	0.25
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	27	0.25
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	10	0.25
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	10	0.25
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	27	0.25



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	27	0.25
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	27	0.25
(1,1482)	1:A:48:LYS:H	1:A:48:LYS:HG2	20	0.25
(1,1482)	1:A:48:LYS:H	1:A:48:LYS:HG3	20	0.25
(1,1463)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD3	11	0.25
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH11	17	0.25
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH12	17	0.25
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH21	17	0.25
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH22	17	0.25
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	10	0.25
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	16	0.25
(1,1201)	1:A:50:VAL:H	1:A:50:VAL:HG21	28	0.25
(1,1201)	1:A:50:VAL:H	1:A:50:VAL:HG22	28	0.25
(1,1201)	1:A:50:VAL:H	1:A:50:VAL:HG23	28	0.25
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG21	16	0.25
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG22	16	0.25
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG23	16	0.25
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	28	0.25
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	28	0.25
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	28	0.25
(1,997)	1:A:12:GLN:HA	1:A:12:GLN:HG3	21	0.24
(1,541)	1:A:33:LYS:HA	1:A:33:LYS:HG2	20	0.24
(1,449)	1:A:4:THR:HA	1:A:4:THR:HG21	23	0.24
(1,449)	1:A:4:THR:HA	1:A:4:THR:HG22	23	0.24
(1,449)	1:A:4:THR:HA	1:A:4:THR:HG23	23	0.24
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	28	0.24
(1,166)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HG2	15	0.24
(1,166)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HG3	15	0.24
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	4	0.24
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH11	21	0.24
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH12	21	0.24
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH21	21	0.24
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH22	21	0.24
(1,1547)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:38:PRO:HD2	9	0.24
(1,1547)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB2	9	0.24
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	25	0.24
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH11	11	0.24
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH12	11	0.24
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH21	11	0.24
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH22	11	0.24
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH11	15	0.24
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH12	15	0.24



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

(1,1413)       1:A:103:ARG:HD3       1:A:103:ARG:HH21       15       0.24         (1,1413)       1:A:103:ARG:HD3       1:A:103:ARG:HH22       15       0.24         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HD3       27       0.24         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HD3       27       0.24         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HD3       28       0.24         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HD3       28       0.24         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HD3       28       0.24         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HD3       28       0.24         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HD3       28       0.24         (1,1126)       1:A:5:VAL:H       1:A:63:PRO:HD3       28       0.24         (1,1126)       1:A:5:VAL:H       1:A:4:THR:HG21       30       0.24         (1,1126)       1:A:5:VAL:H       1:A:4:THR:HG22       30       0.24         (1,1997)       1:A:12:GLN:HA       1:A:12:GLN:HG3       28       0.23         (1,692)       1:A:95:ASN:HA       1:A:95:ASN:HB3       2       0.23         (1,233)       1:A:36:GLU:HB2 <th></th>	
(1,1351)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HD3       27       0.24         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HD3       27       0.24         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HD3       28       0.24         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HD3       28       0.24         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HD3       28       0.24         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HD3       28       0.24         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HD3       28       0.24         (1,1126)       1:A:5:VAL:H       1:A:4:THR:HG21       30       0.24         (1,1126)       1:A:5:VAL:H       1:A:4:THR:HG22       30       0.24         (1,997)       1:A:12:GLN:HA       1:A:4:THR:HG23       30       0.24         (1,692)       1:A:95:ASN:HA       1:A:95:ASN:HB3       2       0.23         (1,233)       1:A:36:GLU:HB2       1:A:36:GLU:HG2       1       0.23	
(1,1351)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HD3       27       0.24         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HD3       27       0.24         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HD3       28       0.24         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HD3       28       0.24         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HD3       28       0.24         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HD3       28       0.24         (1,1126)       1:A:5:VAL:H       1:A:4:THR:HG21       30       0.24         (1,1126)       1:A:5:VAL:H       1:A:4:THR:HG22       30       0.24         (1,1126)       1:A:5:VAL:H       1:A:4:THR:HG23       30       0.24         (1,997)       1:A:12:GLN:HA       1:A:12:GLN:HG3       28       0.23         (1,692)       1:A:95:ASN:HA       1:A:95:ASN:HB3       2       0.23         (1,233)       1:A:36:GLU:HB2       1:A:36:GLU:HG2       1       0.23	
(1,1351)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HD3       27       0.24         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HD3       28       0.24         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HD3       28       0.24         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HD3       28       0.24         (1,1126)       1:A:5:VAL:H       1:A:4:THR:HG21       30       0.24         (1,1126)       1:A:5:VAL:H       1:A:4:THR:HG22       30       0.24         (1,1126)       1:A:5:VAL:H       1:A:4:THR:HG23       30       0.24         (1,997)       1:A:12:GLN:HA       1:A:12:GLN:HG3       28       0.23         (1,692)       1:A:95:ASN:HA       1:A:95:ASN:HB3       2       0.23         (1,233)       1:A:36:GLU:HB2       1:A:36:GLU:HG2       1       0.23	
(1,1351)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HD3       28       0.24         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HD3       28       0.24         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HD3       28       0.24         (1,1126)       1:A:5:VAL:H       1:A:4:THR:HG21       30       0.24         (1,1126)       1:A:5:VAL:H       1:A:4:THR:HG22       30       0.24         (1,1126)       1:A:5:VAL:H       1:A:4:THR:HG23       30       0.24         (1,997)       1:A:12:GLN:HA       1:A:12:GLN:HG3       28       0.23         (1,692)       1:A:95:ASN:HA       1:A:95:ASN:HB3       2       0.23         (1,233)       1:A:36:GLU:HB2       1:A:36:GLU:HG2       1       0.23	
(1,1351)       1:A:89:VAL:HG12       1:A:63:PRO:HD3       28       0.24         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HD3       28       0.24         (1,1126)       1:A:5:VAL:H       1:A:4:THR:HG21       30       0.24         (1,1126)       1:A:5:VAL:H       1:A:4:THR:HG22       30       0.24         (1,1126)       1:A:5:VAL:H       1:A:4:THR:HG23       30       0.24         (1,997)       1:A:12:GLN:HA       1:A:12:GLN:HG3       28       0.23         (1,692)       1:A:95:ASN:HA       1:A:95:ASN:HB3       2       0.23         (1,233)       1:A:36:GLU:HB2       1:A:36:GLU:HG2       1       0.23	
(1,1351)       1:A:89:VAL:HG13       1:A:63:PRO:HD3       28       0.24         (1,1126)       1:A:5:VAL:H       1:A:4:THR:HG21       30       0.24         (1,1126)       1:A:5:VAL:H       1:A:4:THR:HG22       30       0.24         (1,1126)       1:A:5:VAL:H       1:A:4:THR:HG23       30       0.24         (1,997)       1:A:12:GLN:HA       1:A:12:GLN:HG3       28       0.23         (1,692)       1:A:95:ASN:HA       1:A:95:ASN:HB3       2       0.23         (1,233)       1:A:36:GLU:HB2       1:A:36:GLU:HG2       1       0.23	
(1,1126)       1:A:5:VAL:H       1:A:4:THR:HG21       30       0.24         (1,1126)       1:A:5:VAL:H       1:A:4:THR:HG22       30       0.24         (1,1126)       1:A:5:VAL:H       1:A:4:THR:HG23       30       0.24         (1,997)       1:A:12:GLN:HA       1:A:12:GLN:HG3       28       0.23         (1,692)       1:A:95:ASN:HA       1:A:95:ASN:HB3       2       0.23         (1,233)       1:A:36:GLU:HB2       1:A:36:GLU:HG2       1       0.23	
(1,1126)       1:A:5:VAL:H       1:A:4:THR:HG22       30       0.24         (1,1126)       1:A:5:VAL:H       1:A:4:THR:HG23       30       0.24         (1,997)       1:A:12:GLN:HA       1:A:12:GLN:HG3       28       0.23         (1,692)       1:A:95:ASN:HA       1:A:95:ASN:HB3       2       0.23         (1,233)       1:A:36:GLU:HB2       1:A:36:GLU:HG2       1       0.23	
(1,1126)       1:A:5:VAL:H       1:A:4:THR:HG23       30       0.24         (1,997)       1:A:12:GLN:HA       1:A:12:GLN:HG3       28       0.23         (1,692)       1:A:95:ASN:HA       1:A:95:ASN:HB3       2       0.23         (1,233)       1:A:36:GLU:HB2       1:A:36:GLU:HG2       1       0.23	
(1,997)       1:A:12:GLN:HA       1:A:12:GLN:HG3       28       0.23         (1,692)       1:A:95:ASN:HA       1:A:95:ASN:HB3       2       0.23         (1,233)       1:A:36:GLU:HB2       1:A:36:GLU:HG2       1       0.23	
(1,692)       1:A:95:ASN:HA       1:A:95:ASN:HB3       2       0.23         (1,233)       1:A:36:GLU:HB2       1:A:36:GLU:HG2       1       0.23	
(1,233) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:GLU:HG2 1 0.23	
(1,233) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:GLU:HG2 2 0.23	
(1,233) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:GLU:HG2 3 0.23	
(1,233) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:GLU:HG2 4 0.23	
(1,233) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:GLU:HG2 6 0.23	
(1,233) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:GLU:HG2 8 0.23	
(1,233) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:GLU:HG2 12 0.23	
(1,233) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:GLU:HG2 14 0.23	
(1,233) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:GLU:HG2 15 0.23	
(1,233) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:GLU:HG2 16 0.23	
(1,233) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:GLU:HG2 17 0.23	
(1,233) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:GLU:HG2 19 0.23	
(1,233) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:GLU:HG2 20 0.23	
(1,233) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:GLU:HG2 22 0.23	
(1,233) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:GLU:HG2 23 0.23	
(1,233) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:GLU:HG2 24 0.23	
(1,233) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:GLU:HG2 26 0.23	
(1,233) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:GLU:HG2 27 0.23	
(1,233) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:GLU:HG2 28 0.23	
(1,233) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:GLU:HG2 29 0.23	
(1,233) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:GLU:HG2 30 0.23	
(1,207) 1:A:5:VAL:HG11 1:A:71:GLN:HE22 13 0.23	
(1,207) 1:A:5:VAL:HG12 1:A:71:GLN:HE22 13 0.23	
(1,207) 1:A:5:VAL:HG13 1:A:71:GLN:HE22 13 0.23	
(1,1564) 1:A:103:ARG:HD2 1:A:103:ARG:HH11 25 0.23	
(1,1564) 1:A:103:ARG:HD2 1:A:103:ARG:HH12 25 0.23	
(1,1564) 1:A:103:ARG:HD2 1:A:103:ARG:HH21 25 0.23	
(1,1564) 1:A:103:ARG:HD2 1:A:103:ARG:HH22 25 0.23	
(1,1560) 1:A:66:ASP:HA 1:A:65:VAL:HG11 6 0.23	



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1560)	1:A:66:ASP:HA	1:A:65:VAL:HG12	6	0.23
(1,1560)	1:A:66:ASP:HA	1:A:65:VAL:HG13	6	0.23
(1,1481)	1:A:87:LYS:HB2	1:A:84:GLU:HA	10	0.23
(1,1481)	1:A:87:LYS:HB3	1:A:84:GLU:HA	10	0.23
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH11	14	0.23
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH12	14	0.23
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH21	14	0.23
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH22	14	0.23
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	4	0.23
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	26	0.23
(1,121)	1:A:23:ASN:HB3	1:A:23:ASN:HA	1	0.23
(1,121)	1:A:23:ASN:HB3	1:A:23:ASN:HA	3	0.23
(1,121)	1:A:23:ASN:HB3	1:A:23:ASN:HA	12	0.23
(1,121)	1:A:23:ASN:HB3	1:A:23:ASN:HA	14	0.23
(1,121)	1:A:23:ASN:HB3	1:A:23:ASN:HA	18	0.23
(1,121)	1:A:23:ASN:HB3	1:A:23:ASN:HA	19	0.23
(1,121)	1:A:23:ASN:HB3	1:A:23:ASN:HA	20	0.23
(1,1182)	1:A:117:LYS:HG2	1:A:117:LYS:HE3	20	0.23
(1,997)	1:A:12:GLN:HA	1:A:12:GLN:HG3	7	0.22
(1,997)	1:A:12:GLN:HA	1:A:12:GLN:HG3	16	0.22
(1,937)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB3	9	0.22
(1,937)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB3	10	0.22
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD21	28	0.22
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD22	28	0.22
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD23	28	0.22
(1,692)	1:A:95:ASN:HA	1:A:95:ASN:HB3	4	0.22
(1,692)	1:A:95:ASN:HA	1:A:95:ASN:HB3	9	0.22
(1,692)	1:A:95:ASN:HA	1:A:95:ASN:HB3	14	0.22
(1,541)	1:A:33:LYS:HA	1:A:33:LYS:HG2	3	0.22
(1,521)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:103:ARG:HA	23	0.22
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	9	0.22
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	27	0.22
(1,1417)	1:A:44:MET:HE1	1:A:39:GLU:HG3	7	0.22
(1,1417)	1:A:44:MET:HE2	1:A:39:GLU:HG3	7	0.22
(1,1417)	1:A:44:MET:HE3	1:A:39:GLU:HG3	7	0.22
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH11	22	0.22
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH12	22	0.22
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH21	22	0.22
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH22	22	0.22
(1,121)	1:A:23:ASN:HB3	1:A:23:ASN:HA	5	0.22
(1,121)	1:A:23:ASN:HB3	1:A:23:ASN:HA	15	0.22
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	7	0.22



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

(1,1069) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:5:VAL:H 7 0.22 (1,1069) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:5:VAL:H 7 0.22 (1,1069) 1:A:5:VAL:HG21 1:A:5:VAL:H 8 0.22 (1,1069) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:5:VAL:H 8 0.22 (1,1069) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:5:VAL:H 8 0.22 (1,1069) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:5:VAL:H 8 0.22 (1,997) 1:A:12:GLN:HA 1:A:12:GLN:HG3 30 0.21 (1,937) 1:A:12:GLN:HA 1:A:12:GLN:HG3 30 0.21 (1,937) 1:A:12:GLN:HB3 1:A:64:LEU:HD21 27 0.21 (1,82) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:64:LEU:HD22 27 0.21 (1,82) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:64:LEU:HD22 27 0.21 (1,82) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:64:LEU:HD22 27 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 15 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 15 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 24 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 25 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:15:ARG:HD2 4 0.21 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 27 0.21 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 27 0.21 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 27 0.21 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 27 0.21 (1,407) 1:A:76:ARG:HA 1:A:76:ARG:HG3 6 0.21 (1,407) 1:A:76:ARG:HA 1:A:76:ARG:HG3 7 0.21 (1,1560) 1:A:66:ASP:HA 1:A:36:GLU:HB3 1 0.21 (1,1567) 1:A:31:LYS:HA 1:A:36:GLU:HB3 1 0.21 (1,1567) 1:A:34:MET:HE2 1:	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1069)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:5:VAL:H         8         0.22           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:5:VAL:H         8         0.22           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:5:VAL:H         8         0.22           (1,997)         1:A:12:GLN:HA         1:A:2:GLN:HG3         30         0.21           (1,937)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:64:LEU:HD21         27         0.21           (1,82)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:64:LEU:HD22         27         0.21           (1,82)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:64:LEU:HD23         27         0.21           (1,692)         1:A:95:ASN:HA         1:A:95:ASN:HB3         15         0.21           (1,692)         1:A:95:ASN:HA         1:A:95:ASN:HB3         15         0.21           (1,692)         1:A:95:ASN:HA         1:A:95:ASN:HB3         24         0.21           (1,692)         1:A:95:ASN:HA         1:A:95:ASN:HB3         25         0.21           (1,692)         1:A:95:ASN:HA         1:A:95:ASN:HB3         24         0.21           (1,692)         1:A:95:ASN:HA         1:A:95:ASN:HB3         24         0.21           (1,692)         1:A:95:ASN:HA         1:A:95:ASN:HB3         1	(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	7	0.22
(1,1069)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:5:VAL:H         8         0.22           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:5:VAL:H         8         0.22           (1,997)         1:A:12:GLN:HA         1:A:12:GLN:HG3         30         0.21           (1,937)         1:A:12:ASP:H         1:A:12:ASP:HB3         26         0.21           (1,82)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:64:LEU:HD21         27         0.21           (1,82)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:64:LEU:HD23         27         0.21           (1,692)         1:A:95:ASN:HA         1:A:95:ASN:HB3         10         0.21           (1,692)         1:A:95:ASN:HA         1:A:95:ASN:HB3         25         0.21           (1,6)         1:A:12:GLN:HA         1:A:15:ARG:HD2         4         0.21           (1,602)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         27         0.21           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         <	(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	7	0.22
(1,1069) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:5:VAL:H 8 0.22 (1,997) 1:A:12:GLN:HA 1:A:12:GLN:HG3 30 0.21 (1,937) 1:A:123:ASP:H 1:A:123:ASP:HB3 26 0.21 (1,82) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:64:LEU:HD21 27 0.21 (1,82) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:64:LEU:HD22 27 0.21 (1,82) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:64:LEU:HD23 27 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 10 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 15 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 15 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 25 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 24 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 25 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 25 0.21 (1,602) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 25 0.21 (1,602) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 25 0.21 (1,602) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 25 0.21 (1,603) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 27 0.21 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 27 0.21 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 27 0.21 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 27 0.21 (1,407) 1:A:76:ARG:HA 1:A:76:ARG:HG3 6 0.21 (1,407) 1:A:76:ARG:HA 1:A:76:ARG:HG3 6 0.21 (1,407) 1:A:76:ARG:HA 1:A:76:ARG:HG3 6 0.21 (1,1587) 1:A:31:LYS:HB 1:A:38:PRO:HD2 27 0.21 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 7 0.21 (1,1560) 1:A:66:ASP:HA 1:A:65:VAL:HG11 13 0.21 (1,1560) 1:A:66:ASP:HA 1:A:65:VAL:HG12 13 0.21 (1,1547) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:GLU:HB3 14:A:36:GLU:HB3 15:A:36:GLU:HB3 15:A:36:GLU:HB	(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	8	0.22
(1,997)         1:A:12:GLN:HA         1:A:12:GLN:HG3         30         0.21           (1,937)         1:A:123:ASP:H         1:A:123:ASP:HB3         26         0.21           (1,82)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:64:LEU:HD21         27         0.21           (1,82)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:64:LEU:HD23         27         0.21           (1,692)         1:A:95:ASN:HA         1:A:95:ASN:HB3         10         0.21           (1,692)         1:A:95:ASN:HA         1:A:95:ASN:HB3         15         0.21           (1,692)         1:A:95:ASN:HA         1:A:95:ASN:HB3         24         0.21           (1,692)         1:A:95:ASN:HA         1:A:95:ASN:HB3         25         0.21           (1,692)         1:A:95:ASN:HA         1:A:15:ARG:HD3         4         0.21           (1,692)         1:A:95:ASN:HA         1:A:15:ARG:HD3         4         0.21           (1,692)         1:A:36:ASN:HA         1:A:15:ARG:HD3         <	(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	8	0.22
(1,937) 1:A:123:ASP:H 1:A:123:ASP:HB3 26 0.21 (1,82) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:64:LEU:HD21 27 0.21 (1,82) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:64:LEU:HD22 27 0.21 (1,82) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:64:LEU:HD23 27 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 10 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 15 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 24 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 25 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 25 0.21 (1,69) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 25 0.21 (1,69) 1:A:91:ASP:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 25 0.21 (1,69) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:ARG:HD2 4 0.21 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 27 0.21 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 27 0.21 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 27 0.21 (1,407) 1:A:76:ARG:HA 1:A:76:ARG:HG3 6 0.21 (1,407) 1:A:76:ARG:HA 1:A:76:ARG:HG3 6 0.21 (1,1618) 1:A:43:THR:H 1:A:40:ASP:OD1 28 0.21 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 7 0.21 (1,1560) 1:A:66:ASP:HA 1:A:65:VAL:HG11 13 0.21 (1,1560) 1:A:66:ASP:HA 1:A:65:VAL:HG11 13 0.21 (1,1547) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 4 0.21 (1,1547) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:38:PRO:HD2 4 0.21 (1,1547) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:38:PRO:HD2 4 0.21 (1,1547) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 4 0.21 (1,1547) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:16:THR:HG21 1:A:20:SER:HB3 14 0.21 (1,1382) 1:A:16:THR:HG21 1:A:20:SER:HB3 14 0.21 (1,1382) 1:A:16:THR:HG22 1:A:20:SER:HB3 14 0.21 (1,1387)	(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	8	0.22
(1,82) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:64:LEU:HD21 27 0.21 (1,82) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:64:LEU:HD22 27 0.21 (1,82) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:64:LEU:HD23 27 0.21 (1,82) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 10 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 15 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 15 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 24 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 25 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 25 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 25 0.21 (1,60) 1:A:12:GLN:HA 1:A:15:ARG:HD2 4 0.21 (1,60) 1:A:12:GLN:HA 1:A:15:ARG:HD3 4 0.21 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 27 0.21 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 27 0.21 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 27 0.21 (1,407) 1:A:76:ARG:HA 1:A:76:ARG:HG3 6 0.21 (1,407) 1:A:76:ARG:HA 1:A:76:ARG:HG3 6 0.21 (1,407) 1:A:76:ARG:HA 1:A:76:ARG:HG3 24 0.21 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 7 0.21 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 7 0.21 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:36:GLU:HB3 7 0.21 (1,1560) 1:A:66:ASP:HA 1:A:65:VAL:HG11 13 0.21 (1,1560) 1:A:66:ASP:HA 1:A:65:VAL:HG11 13 0.21 (1,1560) 1:A:66:ASP:HA 1:A:65:VAL:HG11 13 0.21 (1,1547) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:38:PRO:HD2 4 0.21 (1,1547) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:GLU:HB2 4 0.21 (1,1547) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:38:PRO:HD2 4 0.21 (1,1547) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:20:SER:HB3 14 0.21 (1,1382) 1:A:16:THR:HG21 1:A:20:SER:HB3 14 0.21 (1,1382) 1:A:16:THR:HG22 1:A:20:SER:HB3 14 0.21 (1,1387) 1:A:16:THR:HG23 1:A:20:SER:HB3 14 0.21 (1,1387) 1:A:16:THR:HG23 1:A	(1,997)	1:A:12:GLN:HA	1:A:12:GLN:HG3	30	0.21
(1,82) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:64:LEU:HD22 27 0.21 (1,82) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 10 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 15 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 15 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 24 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 24 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 25 0.21 (1,60) 1:A:12:GLN:HA 1:A:15:ARG:HD2 4 0.21 (1,6) 1:A:12:GLN:HA 1:A:15:ARG:HD2 4 0.21 (1,6) 1:A:12:GLN:HA 1:A:15:ARG:HD3 4 0.21 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 27 0.21 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 27 0.21 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 27 0.21 (1,407) 1:A:76:ARG:HA 1:A:76:ARG:HG3 6 0.21 (1,407) 1:A:76:ARG:HA 1:A:76:ARG:HG3 6 0.21 (1,1618) 1:A:43:THR:H 1:A:40:ASP:OD1 28 0.21 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 7 0.21 (1,1560) 1:A:66:ASP:HA 1:A:65:VAL:HG11 13 0.21 (1,1560) 1:A:66:ASP:HA 1:A:65:VAL:HG11 13 0.21 (1,1547) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:38:PRO:HD2 4 0.21 (1,1547) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:GLU:HB3 7 0.21 (1,1547) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:FVAL:HG13 13 0.21 (1,1547) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:36:FVAL:HG13 14 0.21 (1,1382) 1:A:16:THR:HG21 1:A:20:SER:HB2 14 0.21 (1,1382) 1:A:16:THR:HG21 1:A:20:SER:HB3 14 0.21 (1,1382) 1:A:16:THR:HG21 1:A:20:SER:HB3 14 0.21 (1,1382) 1:A:16:THR:HG22 1:A:20:SER:HB3 14 0.21 (1,1387) 1:A:54:MET:HE1 1:A:11:LEU:HD11 14 0.21 (1,1367) 1:A:54:MET:HE1 1:A:11:LEU:HD11 14 0.21	(1,937)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB3	26	0.21
(1,82) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:64:LEU:HD23 27 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 10 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 15 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 15 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 24 0.21 (1,692) 1:A:95:ASN:HA 1:A:95:ASN:HB3 25 0.21 (1,6) 1:A:12:GLN:HA 1:A:15:ARG:HD2 4 0.21 (1,6) 1:A:12:GLN:HA 1:A:15:ARG:HD2 4 0.21 (1,6) 1:A:12:GLN:HA 1:A:15:ARG:HD3 4 0.21 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 27 0.21 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 27 0.21 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 27 0.21 (1,407) 1:A:76:ARG:HA 1:A:76:ARG:HG3 6 0.21 (1,407) 1:A:76:ARG:HA 1:A:76:ARG:HG3 6 0.21 (1,407) 1:A:76:ARG:HA 1:A:76:ARG:HG3 24 0.21 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 7 0.21 (1,1587) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 7 0.21 (1,1587) 1:A:66:ASP:HA 1:A:65:VAL:HG11 13 0.21 (1,1560) 1:A:66:ASP:HA 1:A:65:VAL:HG11 13 0.21 (1,1560) 1:A:66:ASP:HA 1:A:65:VAL:HG11 13 0.21 (1,1547) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:38:PRO:HD2 4 0.21 (1,1463) 1:A:38:PRO:HD2 1:A:31:LYS:HA 1:A:36:GLU:HB2 4 0.21 (1,1463) 1:A:38:PRO:HD2 1:A:31:LYS:HB 1:A:38:PRO:HD2 4 0.21 (1,1463) 1:A:38:PRO:HD2 1:A:31:LYS:HB 1 0.21 (1,1382) 1:A:16:THR:HG21 1:A:20:SER:HB2 14 0.21 (1,1382) 1:A:16:THR:HG21 1:A:20:SER:HB3 14 0.21 (1,1382) 1:A:16:THR:HG22 1:A:20:SER:HB3 14 0.21 (1,1382) 1:A:16:THR:HG22 1:A:20:SER:HB3 14 0.21 (1,1382) 1:A:16:THR:HG23 1:A:20:SER:HB3 14 0.21 (1,1367) 1:A:54:MET:HE1 1:A:11:LEU:HD11 14 0.21 (1,1367) 1:A:54:MET:HE1 1:A:11:LEU:HD11 14 0.21 (1,1367) 1:A:54:MET:HE1 1:A	(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD21	27	0.21
(1,692)         1:A:95:ASN:HA         1:A:95:ASN:HB3         10         0.21           (1,692)         1:A:95:ASN:HA         1:A:95:ASN:HB3         15         0.21           (1,692)         1:A:95:ASN:HA         1:A:95:ASN:HB3         24         0.21           (1,692)         1:A:95:ASN:HA         1:A:95:ASN:HB3         25         0.21           (1,6)         1:A:12:GLN:HA         1:A:15:ARG:HD2         4         0.21           (1,6)         1:A:12:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         27         0.21           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         27         0.21           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         27         0.21           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         27         0.21           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         27         0.21           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         6         0.21           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         24         0.21           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         7         0.21           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:36:GLU:HB3	(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD22	27	0.21
(1,692)         1:A:95:ASN:HA         1:A:95:ASN:HB3         15         0.21           (1,692)         1:A:95:ASN:HA         1:A:95:ASN:HB3         24         0.21           (1,692)         1:A:95:ASN:HA         1:A:95:ASN:HB3         25         0.21           (1,6)         1:A:12:GLN:HA         1:A:15:ARG:HD2         4         0.21           (1,6)         1:A:12:GLN:HA         1:A:15:ARG:HD3         4         0.21           (1,6)         1:A:12:GLN:HA         1:A:15:ARG:HD2         4         0.21           (1,6)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         27         0.21           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         27         0.21           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         27         0.21           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         27         0.21           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         24         0.21           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         24         0.21           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         7         0.21           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3 <td< td=""><td>(1,82)</td><td>1:A:61:GLU:HB3</td><td>1:A:64:LEU:HD23</td><td>27</td><td>0.21</td></td<>	(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD23	27	0.21
(1,692)         1:A:95:ASN:HA         1:A:95:ASN:HB3         24         0.21           (1,692)         1:A:95:ASN:HA         1:A:95:ASN:HB3         25         0.21           (1,6)         1:A:12:GLN:HA         1:A:15:ARG:HD2         4         0.21           (1,6)         1:A:12:GLN:HA         1:A:15:ARG:HD3         4         0.21           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         27         0.21           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         27         0.21           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         27         0.21           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         6         0.21           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         24         0.21           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         7         0.21           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:36:GLU:HB3         7         0.21           (1,1580)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG11         13         0.21           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:33:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB2         4         0.21           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2	(1,692)	1:A:95:ASN:HA	1:A:95:ASN:HB3	10	0.21
(1,692)         1:A:95:ASN:HA         1:A:95:ASN:HB3         25         0.21           (1,6)         1:A:12:GLN:HA         1:A:15:ARG:HD2         4         0.21           (1,6)         1:A:12:GLN:HA         1:A:15:ARG:HD3         4         0.21           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         27         0.21           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         27         0.21           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         27         0.21           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         27         0.21           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         6         0.21           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         24         0.21           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         24         0.21           (1,1560)         1:A:3:6:CLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         7         0.21           (1,1587)         1:A:36:ASP:HA         1:A:36:SU:HB3         7         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG12         13         0.21           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:33:LYS:HA	(1,692)	1:A:95:ASN:HA	1:A:95:ASN:HB3	15	0.21
(1,6)         1:A:12:GLN:HA         1:A:15:ARG:HD2         4         0.21           (1,6)         1:A:12:GLN:HA         1:A:15:ARG:HD3         4         0.21           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         27         0.21           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         27         0.21           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         27         0.21           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         6         0.21           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         24         0.21           (1,407)         1:A:36:ARG:HA         1:A:40:ASP:OD1         28         0.21           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         28         0.21           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         7         0.21           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:36:GLU:HB3         7         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG11         13         0.21           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:38:PRO:HD2         4         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:38:PRO:HD2	(1,692)	1:A:95:ASN:HA	1:A:95:ASN:HB3	24	0.21
(1,6)         1:A:12:GLN:HA         1:A:15:ARG:HD2         4         0.21           (1,6)         1:A:12:GLN:HA         1:A:15:ARG:HD3         4         0.21           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         27         0.21           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         27         0.21           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         27         0.21           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         6         0.21           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         24         0.21           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         24         0.21           (1,407)         1:A:36:ARG:HA         1:A:40:ASP:OD1         28         0.21           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         28         0.21           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:36:GLU:HB3         7         0.21           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:36:GLU:HB3         7         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG11         13         0.21           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:38:PRO:HD2	(1,692)	1:A:95:ASN:HA	1:A:95:ASN:HB3	25	0.21
(1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         27         0.21           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         27         0.21           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         27         0.21           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         6         0.21           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         24         0.21           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         28         0.21           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         7         0.21           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:36:GLU:HB3         7         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG11         13         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG12         13         0.21           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:38:PRO:HD2         4         0.21           (1,1547)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB2         4         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         16         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG21         1:A:20:SER:HB	(1,6)	1:A:12:GLN:HA	1:A:15:ARG:HD2	4	0.21
(1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         27         0.21           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         27         0.21           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         6         0.21           (1,407)         1:A:6:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         24         0.21           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         28         0.21           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         7         0.21           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         7         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG11         13         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG12         13         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         13         0.21           (1,1547)         1:A:33:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB2         4         0.21           (1,1547)         1:A:33:LYS:HA         1:A:33:LYS:HD3         16         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         16         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG21         1:A:20:SER:HB2<		1:A:12:GLN:HA	1:A:15:ARG:HD3	4	0.21
(1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         27         0.21           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         6         0.21           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         24         0.21           (1,1618)         1:A:76:ARG:HA         1:A:40:ASP:OD1         28         0.21           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         7         0.21           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         7         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG11         13         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG12         13         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         13         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         13         0.21           (1,1547)         1:A:33:LYS:HA         1:A:38:PRO:HD2         4         0.21           (1,1547)         1:A:33:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB2         4         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         16         0.21           (1,1463)         1:A:16:THR:HG21         1:A:20:SER:HB2	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	27	0.21
(1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         6         0.21           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         24         0.21           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         28         0.21           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         7         0.21           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         7         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG11         13         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         13         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         13         0.21           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:38:PRO:HD2         4         0.21           (1,1547)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB2         4         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         16         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         25         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG21         1:A:20:SER:HB2         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG22         1:A:20:SER:HB	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	27	0.21
(1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         24         0.21           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         28         0.21           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         7         0.21           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         7         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG11         13         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG12         13         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         13         0.21           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:38:PRO:HD2         4         0.21           (1,1547)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB2         4         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         16         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         25         0.21           (1,1463)         1:A:16:THR:HG21         1:A:20:SER:HB2         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG21         1:A:20:SER:HB3         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG23         1:A:20:SE	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	27	0.21
(1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         28         0.21           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         7         0.21           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         7         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG11         13         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG12         13         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         13         0.21           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:38:PRO:HD2         4         0.21           (1,1547)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB2         4         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         16         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         25         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG21         1:A:20:SER:HB2         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG21         1:A:20:SER:HB3         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG22         1:A:20:SER:HB3         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG23         1:A:20	(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	6	0.21
(1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         7         0.21           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         7         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG11         13         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG12         13         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         13         0.21           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:38:PRO:HD2         4         0.21           (1,1547)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB2         4         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         16         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         25         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG21         1:A:20:SER:HB2         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG21         1:A:20:SER:HB3         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG22         1:A:20:SER:HB3         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG23         1:A:20:SER:HB3         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG23         1:A	(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	24	0.21
(1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         7         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG11         13         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG12         13         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         13         0.21           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:38:PRO:HD2         4         0.21           (1,1547)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB2         4         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         16         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         25         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         25         0.21           (1,1463)         1:A:16:THR:HG21         1:A:20:SER:HB2         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG21         1:A:20:SER:HB3         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG22         1:A:20:SER:HB3         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG23         1:A:20:SER:HB3         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG23         1:	(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	28	0.21
(1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG11         13         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG12         13         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         13         0.21           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:38:PRO:HD2         4         0.21           (1,1547)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB2         4         0.21           (1,1547)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB2         4         0.21           (1,1547)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB2         4         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         16         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         25         0.21           (1,1463)         1:A:16:THR:HG21         1:A:20:SER:HB2         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG22         1:A:20:SER:HB3         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG23         1:A:20:SER:HB3         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG23         1:A:20:SER:HB3         14         0.21           (1,1387)         1:A:34:MET:HE1         1:A:1	(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	7	0.21
(1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG12         13         0.21           (1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         13         0.21           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:38:PRO:HD2         4         0.21           (1,1547)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB2         4         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         16         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         25         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         25         0.21           (1,1463)         1:A:16:THR:HG21         1:A:20:SER:HB2         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG21         1:A:20:SER:HB3         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG22         1:A:20:SER:HB3         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG23         1:A:20:SER:HB3         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG23         1:A:20:SER:HB3         14         0.21           (1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD11         14         0.21           (1,1367)         1:A:54:MET:HE1 <td< td=""><td>(1,1587)</td><td>1:A:31:LYS:HA</td><td>1:A:36:GLU:HB3</td><td>7</td><td>0.21</td></td<>	(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	7	0.21
(1,1560)         1:A:66:ASP:HA         1:A:65:VAL:HG13         13         0.21           (1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:38:PRO:HD2         4         0.21           (1,1547)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB2         4         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         16         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         25         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         25         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         16         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         16         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         16         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG21         1:A:20:SER:HB3         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG23         1:A:20:SER:HB3         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG23         1:A:20:SER:HB3         14         0.21           (1,1387)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD11         14         0.21           (1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1	(1,1560)	1:A:66:ASP:HA	1:A:65:VAL:HG11	13	0.21
(1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:38:PRO:HD2         4         0.21           (1,1547)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB2         4         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         16         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         25         0.21           (1,1463)         1:A:16:THR:HG21         1:A:20:SER:HB2         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG21         1:A:20:SER:HB3         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG22         1:A:20:SER:HB3         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG23         1:A:20:SER:HB3         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG23         1:A:20:SER:HB3         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG23         1:A:20:SER:HB3         14         0.21           (1,1387)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD11         14         0.21           (1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD13         14         0.21           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD11         14         0.21	(1,1560)	1:A:66:ASP:HA	1:A:65:VAL:HG12	13	0.21
(1,1547)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB2         4         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         16         0.21           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         25         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG21         1:A:20:SER:HB2         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG21         1:A:20:SER:HB3         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG22         1:A:20:SER:HB2         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG23         1:A:20:SER:HB3         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG23         1:A:20:SER:HB2         14         0.21           (1,1382)         1:A:16:THR:HG23         1:A:20:SER:HB3         14         0.21           (1,1387)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD11         14         0.21           (1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD13         14         0.21           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD11         14         0.21	(1,1560)	1:A:66:ASP:HA	1:A:65:VAL:HG13	13	0.21
(1,1463)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD3       16       0.21         (1,1463)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD3       25       0.21         (1,1382)       1:A:16:THR:HG21       1:A:20:SER:HB2       14       0.21         (1,1382)       1:A:16:THR:HG21       1:A:20:SER:HB3       14       0.21         (1,1382)       1:A:16:THR:HG22       1:A:20:SER:HB2       14       0.21         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       14       0.21         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB2       14       0.21         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       14       0.21         (1,1387)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD11       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD12       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD13       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE2       1:A:11:LEU:HD11       14       0.21	(1,1547)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:38:PRO:HD2	4	0.21
(1,1463)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD3       25       0.21         (1,1382)       1:A:16:THR:HG21       1:A:20:SER:HB2       14       0.21         (1,1382)       1:A:16:THR:HG21       1:A:20:SER:HB3       14       0.21         (1,1382)       1:A:16:THR:HG22       1:A:20:SER:HB2       14       0.21         (1,1382)       1:A:16:THR:HG22       1:A:20:SER:HB3       14       0.21         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB2       14       0.21         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       14       0.21         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD11       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD13       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD11       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE2       1:A:11:LEU:HD11       14       0.21	(1,1547)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB2	4	0.21
(1,1382)       1:A:16:THR:HG21       1:A:20:SER:HB2       14       0.21         (1,1382)       1:A:16:THR:HG21       1:A:20:SER:HB3       14       0.21         (1,1382)       1:A:16:THR:HG22       1:A:20:SER:HB2       14       0.21         (1,1382)       1:A:16:THR:HG22       1:A:20:SER:HB3       14       0.21         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB2       14       0.21         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       14       0.21         (1,1387)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD11       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD12       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD13       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE2       1:A:11:LEU:HD11       14       0.21	(1,1463)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD3	16	0.21
(1,1382)       1:A:16:THR:HG21       1:A:20:SER:HB3       14       0.21         (1,1382)       1:A:16:THR:HG22       1:A:20:SER:HB2       14       0.21         (1,1382)       1:A:16:THR:HG22       1:A:20:SER:HB3       14       0.21         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB2       14       0.21         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD11       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD12       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD13       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE2       1:A:11:LEU:HD11       14       0.21	(1,1463)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD3	25	0.21
(1,1382)       1:A:16:THR:HG22       1:A:20:SER:HB2       14       0.21         (1,1382)       1:A:16:THR:HG22       1:A:20:SER:HB3       14       0.21         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB2       14       0.21         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD11       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD12       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD13       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE2       1:A:11:LEU:HD11       14       0.21	(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB2	14	0.21
(1,1382)       1:A:16:THR:HG22       1:A:20:SER:HB3       14       0.21         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB2       14       0.21         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD11       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD12       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD13       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE2       1:A:11:LEU:HD11       14       0.21	(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB3	14	0.21
(1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB2       14       0.21         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD11       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD12       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD13       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE2       1:A:11:LEU:HD11       14       0.21	(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB2	14	0.21
(1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB2       14       0.21         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD11       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD12       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD13       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE2       1:A:11:LEU:HD11       14       0.21	(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB3	14	0.21
(1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD11       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD12       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD13       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE2       1:A:11:LEU:HD11       14       0.21		1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB2	14	0.21
(1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD12       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD13       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE2       1:A:11:LEU:HD11       14       0.21		1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB3	14	0.21
(1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD13       14       0.21         (1,1367)       1:A:54:MET:HE2       1:A:11:LEU:HD11       14       0.21	(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD11	14	0.21
(1,1367) 1:A:54:MET:HE2 1:A:11:LEU:HD11 14 0.21	(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD12	14	0.21
	(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD13	14	0.21
(1,1367) 1:A:54:MET:HE2 1:A:11:LEU:HD12 14 0.21	(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD11	14	0.21
	(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD12	14	0.21



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD13	14	0.21
(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD11	14	0.21
(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD12	14	0.21
(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD13	14	0.21
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	2	0.21
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	3	0.21
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	15	0.21
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	24	0.21
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	27	0.21
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	6	0.21
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	6	0.21
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	6	0.21
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	3	0.2
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	3	0.2
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	3	0.2
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	3	0.2
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	3	0.2
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	3	0.2
(1,692)	1:A:95:ASN:HA	1:A:95:ASN:HB3	18	0.2
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	5	0.2
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	19	0.2
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	24	0.2
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	26	0.2
(1,1563)	1:A:89:VAL:H	1:A:85:VAL:HG11	10	0.2
(1,1563)	1:A:89:VAL:H	1:A:85:VAL:HG12	10	0.2
(1,1563)	1:A:89:VAL:H	1:A:85:VAL:HG13	10	0.2
(1,145)	1:A:95:ASN:HA	1:A:92:ASN:HD22	7	0.2
(1,1391)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:78:ALA:HA	23	0.2
(1,1391)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:78:ALA:HA	23	0.2
(1,1391)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:78:ALA:HA	23	0.2
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	28	0.2
(1,1182)	1:A:117:LYS:HG2	1:A:117:LYS:HE3	2	0.2
(1,1182)	1:A:117:LYS:HG2	1:A:117:LYS:HE3	10	0.2
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	12	0.2
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	12	0.2
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	12	0.2
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	13	0.2
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	13	0.2
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	13	0.2
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	15	0.2
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	15	0.2
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	15	0.2



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

(1,1069)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:5:VAL:H         10         0.2           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:5:VAL:H         10         0.2           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:5:VAL:H         10         0.2           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:5:VAL:H         11         0.2           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:5:VAL:H         11         0.2           (1,105)         1:A:81:VAL:HA         1:A:5:VAL:H         11         0.2           (1,105)         1:A:81:VAL:HA         1:A:82:GLN:HG23         17         0.19           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         21         0.19           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         21         0.19           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         21         0.19           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         21         0.19           (1,509)         1:A:16:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HG23         21         0.19           (1,509)         1:A:16:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         1         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1069)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:5:VAL:H         10         0.2           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:5:VAL:H         11         0.2           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:5:VAL:H         11         0.2           (1,1069)         1:A:S:VAL:HG23         1:A:5:VAL:H         11         0.2           (1,1059)         1:A:S:VAL:HA         1:A:S:VAL:HG2         30         0.2           (1,997)         1:A:12:GLN:HA         1:A:3:THR:HG22         21         0.19           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         21         0.19           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         28         0.19           (1,352)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         1         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA	(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	10	0.2
(1,1069)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:5:VAL:H         11         0.2           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:5:VAL:H         11         0.2           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:5:VAL:H         11         0.2           (1,105)         1:A:81:VAL:HA         1:A:84:GLU:HG2         30         0.2           (1,997)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG21         21         0.19           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG22         21         0.19           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         21         0.19           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:76:ARG:HG3         28         0.19           (1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:76:ARG:HG3         28         0.19           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         28         0.19           (1,407)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         1         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         1         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         8         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA	(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	10	0.2
(1,1069) 1:A:5:VAL:HG22 1:A:5:VAL:H 11 0.2 (1,1069) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:5:VAL:H 11 0.2 (1,1069) 1:A:5:VAL:HG23 1:A:5:VAL:H 11 0.2 (1,1069) 1:A:3:VAL:HA 1:A:8:GLU:HG2 30 0.2 (1,997) 1:A:12:GLN:HA 1:A:12:GLN:HG3 17 0.19 (1,509) 1:A:9:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 21 0.19 (1,509) 1:A:9:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 21 0.19 (1,509) 1:A:9:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 21 0.19 (1,509) 1:A:9:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 21 0.19 (1,352) 1:A:12:ASP:H 1:A:166:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HB4 1 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 1 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 8 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 10 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 20 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 21 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 22 0.19 (1,164) 1:A:106:	(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	10	0.2
(1,1069)	(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	11	0.2
(1,105) 1:A:81:VAL:HA 1:A:84:GLU:HG2 30 0.2 (1,997) 1:A:12:GLN:HA 1:A:12:GLN:HG3 17 0.19 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 21 0.19 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 21 0.19 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 21 0.19 (1,407) 1:A:76:ARG:HA 1:A:76:ARG:HG3 28 0.19 (1,407) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 21 0.19 (1,407) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 1 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 1 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 1 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 7 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 8 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 10 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 19 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 20 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 20 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 21 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 22 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 23 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 25 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 25 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 25 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 27 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 27 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 27 0.19 (1,1564) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 27 0.19 (1,1618) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 29 0.19 (1,1618) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HB	(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	11	0.2
(1,997) 1:A:12:GLN:HA 1:A:12:GLN:HG3 17 0.19 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 21 0.19 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 21 0.19 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 21 0.19 (1,407) 1:A:76:ARG:HA 1:A:76:ARG:HG3 28 0.19 (1,352) 1:A:123:ASP:H 1:A:123:ASP:HB2 17 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 1 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 7 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 8 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 8 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 10 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 16 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 17 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 17 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 19 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 19 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 20 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 21 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 25 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 27 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 27 0.19 (1,1564) 1:A:136:ARG:HD2 1:A:138:PRO:HD2 6 0.19 (1,1564) 1:A:138:ARG:HD2 1:A:138:ARG:HD1 27 0.19 (1,1564) 1:A:133:ARG:HD2 1:A:133:ARG:HD1 27 0.19 (1,1564) 1:A:103:ARG:HD2 1:A:103:ARG:HD1 27 0.19 (1,1564) 1:A:38:PRO:HD2 1:A:31:LYS:HD3 1 0.19 (1,1564) 1:A:3	(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	11	0.2
(1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG21 21 0.19 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 21 0.19 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 21 0.19 (1,407) 1:A:76:ARG:HA 1:A:76:ARG:HG3 28 0.19 (1,352) 1:A:123:ASP:H 1:A:123:ASP:HB2 17 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 1 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 7 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 8 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 10 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 11 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 12 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 19 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 20 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 21 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 21 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 22 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 23 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 25 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 25 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 27 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 29 0.19 (1,1587) 1:A:30:ARG:HD2 1:A:103:ARG:HH11 27 0.19 (1,1564) 1:A:103:ARG:HD2 1:A:103:ARG:HH11 27 0.19 (1,1564) 1:A:103:ARG:HD2 1:A:103:ARG:HH12 27 0.19 (1,1564) 1:A:103:ARG:HD2 1:A:103:ARG:HH22 27 0.19 (1,1463) 1:A:38:PRO:HD2 1:A:31:LYS:HD3 19 0.19 (1,1463) 1:A:38:PRO:HD2 1:A:31:LYS:HD3 19 0.19 (1,1463) 1:A:38:PRO:HD2 1:A:31:LYS:HD3 19 0.19 (1,1564) 1:A:38:PRO:HD2 1:A:31:LYS:HD3 19 0.19 (1,1564) 1:A:38:PRO:HD2 1:A:31:LYS:HD3 19 0.19	(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	30	0.2
(1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG22 21 0.19 (1,509) 1:A:91:LYS:HB3 1:A:93:THR:HG23 21 0.19 (1,407) 1:A:76:ARG:HA 1:A:76:ARG:HG3 28 0.19 (1,352) 1:A:123:ASP:H 1:A:123:ASP:HB2 17 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 1 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 7 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 8 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 10 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 10 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 10 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 13 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 13 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 16 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 17 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 17 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 19 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 19 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 20 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 21 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 21 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 23 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 23 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 25 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 25 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 25 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 27 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 29 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 29 0.19 (1,1564) 1:A:103:ARG:HD2 1:A:103:ARG:HH11 27 0.19 (1,1564) 1:A:103:ARG:HD2 1:A:103:ARG:HH11 27 0.19 (1,1564) 1:A:103:ARG:HD2 1:A:103:ARG:HH12 27 0.19 (1,1564) 1:A:103:ARG:HD2 1:A:103:ARG:HH12 27 0.19 (1,1664) 1:A:103:ARG:HD2 1:A:103:ARG:HH12 27 0.19 (1,1664) 1:A:103:ARG:HD2 1:A:103:ARG:HH12 27 0.19 (1,1664) 1:A:103:ARG:HD2 1:A:103:ARG:HH12 27 0.19 (1,1666) 1:A:89:VAL:HA 1:A:63:PRO:HD3 5 0.19	(1,997)	1:A:12:GLN:HA	1:A:12:GLN:HG3	17	0.19
(1,509)         1:A:91:LYS:HB3         1:A:93:THR:HG23         21         0.19           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         28         0.19           (1,352)         1:A:123:ASP:H         1:A:123:ASP:HB2         17         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         1         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         7         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         8         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         10         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         10         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         13         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         17         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         17         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         18         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         20         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	21	0.19
(1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         28         0.19           (1,352)         1:A:123:ASP:H         1:A:123:ASP:HB2         17         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         1         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         7         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         8         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         10         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         10         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         13         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         16         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         17         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         18         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         19         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         20         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	21	0.19
(1,352)         1:A:123:ASP:H         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HB4         1         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         7         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         7         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         8         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         10         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         13         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         16         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         17         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         18         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         19         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         20         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         23         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         25         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3	(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	21	0.19
(1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         1         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         7         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         8         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         10         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         13         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         16         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         17         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         18         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         19         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         20         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         21         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         23         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         25         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA	(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	28	0.19
(1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 8 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 10 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 10 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 13 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 13 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 16 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 17 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 18 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 19 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 19 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 20 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 21 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 21 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 23 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 25 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 25 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 27 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 28 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 28 0.19 (1,18) 1:A:106:LYS:HB3 1:A:106:LYS:HA 29 0.19 (1,1564) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:38:PRO:HD2 6 0.19 (1,1564) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:36:GLU:HB3 6 0.19 (1,1564) 1:A:31:LYS:HA 1:A:36:GLU:HB3 6 0.19 (1,1564) 1:A:103:ARG:HD2 1:A:103:ARG:HH11 27 0.19 (1,1564) 1:A:103:ARG:HD2 1:A:103:ARG:HH12 27 0.19 (1,1564) 1:A:103:ARG:HD2 1:A:103:ARG:HH22 27 0.19 (1,1463) 1:A:38:PRO:HD2 1:A:103:ARG:HH22 27 0.19 (1,1564) 1:A:103:ARG:HD2 1:A:103:ARG:HH22 27 0.19 (1,1564) 1:A:303:ARG:HD2 1:A:103:ARG:HH22 27 0.19 (1,1564	(1,352)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB2	17	0.19
(1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         7         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         8         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         10         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         13         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         16         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         17         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         18         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         19         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         20         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         21         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         23         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         25         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         27         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA <td>(1,18)</td> <td>1:A:106:LYS:HB3</td> <td>1:A:106:LYS:HA</td> <td>1</td> <td>0.19</td>	(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	1	0.19
(1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         10         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         13         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         16         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         17         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         18         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         19         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         20         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         21         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         23         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         25         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         27         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         28         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         29         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA </td <td>(1,18)</td> <td>1:A:106:LYS:HB3</td> <td>1:A:106:LYS:HA</td> <td>7</td> <td>0.19</td>	(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	7	0.19
(1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         13         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         16         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         17         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         18         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         19         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         20         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         21         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         23         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         25         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         27         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         28         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         29         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         29         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA </td <td>(1,18)</td> <td>1:A:106:LYS:HB3</td> <td>1:A:106:LYS:HA</td> <td>8</td> <td>0.19</td>	(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	8	0.19
(1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         16         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         17         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         18         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         19         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         20         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         21         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         23         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         23         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         25         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         27         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         28         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         29         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         29         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA </td <td>(1,18)</td> <td>1:A:106:LYS:HB3</td> <td>1:A:106:LYS:HA</td> <td>10</td> <td>0.19</td>	(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	10	0.19
(1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         17         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         18         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         19         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         20         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         21         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         23         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         25         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         27         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         28         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         29         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         29         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         29         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         30         0.19           (1,18)         1:A:13:14R:H         1:A:106:LYS:HA	(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	13	0.19
(1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         18         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         19         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         20         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         21         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         23         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         25         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         27         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         28         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         29         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         30         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         30         0.19           (1,18)         1:A:316:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         30         0.19           (1,154)         1:A:33:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         30         0.19           (1,1587)         1:A:33:LYS:HA         1:A:33:LYS:HB3 </td <td>(1,18)</td> <td>1:A:106:LYS:HB3</td> <td>1:A:106:LYS:HA</td> <td>16</td> <td>0.19</td>	(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	16	0.19
(1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         19         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         20         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         21         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         23         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         25         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         27         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         28         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         29         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         30         0.19           (1,18)         1:A:316:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         30         0.19           (1,18)         1:A:316:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         30         0.19           (1,18)         1:A:316:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         30         0.19           (1,154)         1:A:336:GLU:HB3         1:A:106:LYS:HA         30         0.19           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:103:ARG:HD1	(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	17	0.19
(1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         20         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         21         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         23         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         25         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         27         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         28         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         29         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         29         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         30         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         30         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         29         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         29         0.19           (1,161)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         30         0.19           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:103:ARG:HD2<	(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	18	0.19
(1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         21         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         23         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         25         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         27         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         28         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         29         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         29         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         30         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         30         0.19           (1,18)         1:A:31:LYS:HB3         1:A:406:LYS:HA         30         0.19           (1,161)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:106:LYS:HA         30         0.19           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         6         0.19           (1,1564)         1:A:103:ARG:HD2         1:A:103:ARG:HH11         27         0.19           (1,1564)         1:A:103:ARG:HD2         1:A:103:ARG:	(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	19	0.19
(1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         23         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         25         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         27         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         28         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         29         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         30         0.19           (1,1618)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         30         0.19           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         6         0.19           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         6         0.19           (1,1564)         1:A:103:ARG:HD2         1:A:103:ARG:HH11         27         0.19           (1,1564)         1:A:103:ARG:HD2         1:A:103:ARG:HH21         27         0.19           (1,1564)         1:A:103:ARG:HD2         1:A:103:ARG:HH21         27         0.19           (1,1564)         1:A:103:ARG:HD2         1:A:103:ARG:HH22         27         0.19           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2 <t< td=""><td>(1,18)</td><td>1:A:106:LYS:HB3</td><td>1:A:106:LYS:HA</td><td>20</td><td>0.19</td></t<>	(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	20	0.19
(1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         25         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         27         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         28         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         29         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         30         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         30         0.19           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         18         0.19           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         6         0.19           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         6         0.19           (1,1564)         1:A:103:ARG:HD2         1:A:103:ARG:HH11         27         0.19           (1,1564)         1:A:103:ARG:HD2         1:A:103:ARG:HH21         27         0.19           (1,1564)         1:A:103:ARG:HD2         1:A:103:ARG:HH22         27         0.19           (1,1564)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         1         0.19           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:3	(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	21	0.19
(1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         27         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         28         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         29         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         30         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         30         0.19           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         18         0.19           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         6         0.19           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         6         0.19           (1,1564)         1:A:103:ARG:HD2         1:A:103:ARG:HH11         27         0.19           (1,1564)         1:A:103:ARG:HD2         1:A:103:ARG:HH21         27         0.19           (1,1564)         1:A:103:ARG:HD2         1:A:103:ARG:HH22         27         0.19           (1,1564)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         1         0.19           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         1         0.19           (1,1366)         1:A:89:VAL:HA         1:A:63	(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	23	0.19
(1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         27         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         28         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         29         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         30         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         30         0.19           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         18         0.19           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         6         0.19           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         6         0.19           (1,1564)         1:A:103:ARG:HD2         1:A:103:ARG:HH11         27         0.19           (1,1564)         1:A:103:ARG:HD2         1:A:103:ARG:HH21         27         0.19           (1,1564)         1:A:103:ARG:HD2         1:A:103:ARG:HH22         27         0.19           (1,1564)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         1         0.19           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         1         0.19           (1,1366)         1:A:89:VAL:HA         1:A:63	(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	25	0.19
(1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         29         0.19           (1,18)         1:A:106:LYS:HB3         1:A:106:LYS:HA         30         0.19           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         18         0.19           (1,1587)         1:A:36:GLU:HB3         1:A:38:PRO:HD2         6         0.19           (1,1587)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB3         6         0.19           (1,1564)         1:A:103:ARG:HD2         1:A:103:ARG:HH11         27         0.19           (1,1564)         1:A:103:ARG:HD2         1:A:103:ARG:HH21         27         0.19           (1,1564)         1:A:103:ARG:HD2         1:A:103:ARG:HH21         27         0.19           (1,1564)         1:A:103:ARG:HD2         1:A:103:ARG:HH22         27         0.19           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         1         0.19           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         19         0.19           (1,1366)         1:A:89:VAL:HA         1:A:63:PRO:HD3         5         0.19           (1,1351)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HD3         5         0.19	(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	27	0.19
(1,18)       1:A:106:LYS:HB3       1:A:106:LYS:HA       30       0.19         (1,1618)       1:A:43:THR:H       1:A:40:ASP:OD1       18       0.19         (1,1587)       1:A:36:GLU:HB3       1:A:38:PRO:HD2       6       0.19         (1,1587)       1:A:31:LYS:HA       1:A:36:GLU:HB3       6       0.19         (1,1564)       1:A:103:ARG:HD2       1:A:103:ARG:HH11       27       0.19         (1,1564)       1:A:103:ARG:HD2       1:A:103:ARG:HH21       27       0.19         (1,1564)       1:A:103:ARG:HD2       1:A:103:ARG:HH21       27       0.19         (1,1564)       1:A:103:ARG:HD2       1:A:103:ARG:HH22       27       0.19         (1,1463)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD3       1       0.19         (1,1463)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD3       19       0.19         (1,1366)       1:A:89:VAL:HA       1:A:63:PRO:HD3       5       0.19         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HD3       5       0.19	(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	28	0.19
(1,1618)       1:A:43:THR:H       1:A:40:ASP:OD1       18       0.19         (1,1587)       1:A:36:GLU:HB3       1:A:38:PRO:HD2       6       0.19         (1,1587)       1:A:31:LYS:HA       1:A:36:GLU:HB3       6       0.19         (1,1564)       1:A:103:ARG:HD2       1:A:103:ARG:HH11       27       0.19         (1,1564)       1:A:103:ARG:HD2       1:A:103:ARG:HH21       27       0.19         (1,1564)       1:A:103:ARG:HD2       1:A:103:ARG:HH21       27       0.19         (1,1564)       1:A:103:ARG:HD2       1:A:103:ARG:HH22       27       0.19         (1,1463)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD3       1       0.19         (1,1463)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD3       19       0.19         (1,1366)       1:A:89:VAL:HA       1:A:63:PRO:HG3       25       0.19         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HD3       5       0.19	(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	29	0.19
(1,1618)       1:A:43:THR:H       1:A:40:ASP:OD1       18       0.19         (1,1587)       1:A:36:GLU:HB3       1:A:38:PRO:HD2       6       0.19         (1,1587)       1:A:31:LYS:HA       1:A:36:GLU:HB3       6       0.19         (1,1564)       1:A:103:ARG:HD2       1:A:103:ARG:HH11       27       0.19         (1,1564)       1:A:103:ARG:HD2       1:A:103:ARG:HH21       27       0.19         (1,1564)       1:A:103:ARG:HD2       1:A:103:ARG:HH21       27       0.19         (1,1564)       1:A:103:ARG:HD2       1:A:103:ARG:HH22       27       0.19         (1,1463)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD3       1       0.19         (1,1463)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD3       19       0.19         (1,1366)       1:A:89:VAL:HA       1:A:63:PRO:HG3       25       0.19         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HD3       5       0.19	(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	30	0.19
(1,1587)       1:A:31:LYS:HA       1:A:36:GLU:HB3       6       0.19         (1,1564)       1:A:103:ARG:HD2       1:A:103:ARG:HH11       27       0.19         (1,1564)       1:A:103:ARG:HD2       1:A:103:ARG:HH12       27       0.19         (1,1564)       1:A:103:ARG:HD2       1:A:103:ARG:HH21       27       0.19         (1,1564)       1:A:103:ARG:HD2       1:A:103:ARG:HH22       27       0.19         (1,1463)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD3       1       0.19         (1,1463)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD3       19       0.19         (1,1366)       1:A:89:VAL:HA       1:A:63:PRO:HG3       25       0.19         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HD3       5       0.19		1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	18	0.19
(1,1564)       1:A:103:ARG:HD2       1:A:103:ARG:HH11       27       0.19         (1,1564)       1:A:103:ARG:HD2       1:A:103:ARG:HH12       27       0.19         (1,1564)       1:A:103:ARG:HD2       1:A:103:ARG:HH21       27       0.19         (1,1564)       1:A:103:ARG:HD2       1:A:103:ARG:HH22       27       0.19         (1,1463)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD3       1       0.19         (1,1463)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD3       19       0.19         (1,1366)       1:A:89:VAL:HA       1:A:63:PRO:HG3       25       0.19         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HD3       5       0.19	(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	6	0.19
(1,1564)       1:A:103:ARG:HD2       1:A:103:ARG:HH12       27       0.19         (1,1564)       1:A:103:ARG:HD2       1:A:103:ARG:HH21       27       0.19         (1,1564)       1:A:103:ARG:HD2       1:A:103:ARG:HH22       27       0.19         (1,1463)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD3       1       0.19         (1,1463)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD3       19       0.19         (1,1366)       1:A:89:VAL:HA       1:A:63:PRO:HG3       25       0.19         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HD3       5       0.19	(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	6	0.19
(1,1564)       1:A:103:ARG:HD2       1:A:103:ARG:HH21       27       0.19         (1,1564)       1:A:103:ARG:HD2       1:A:103:ARG:HH22       27       0.19         (1,1463)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD3       1       0.19         (1,1463)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD3       19       0.19         (1,1366)       1:A:89:VAL:HA       1:A:63:PRO:HG3       25       0.19         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HD3       5       0.19	(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH11	27	0.19
(1,1564)       1:A:103:ARG:HD2       1:A:103:ARG:HH22       27       0.19         (1,1463)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD3       1       0.19         (1,1463)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD3       19       0.19         (1,1366)       1:A:89:VAL:HA       1:A:63:PRO:HG3       25       0.19         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HD3       5       0.19	· · /	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH12	27	0.19
(1,1463)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD3       1       0.19         (1,1463)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD3       19       0.19         (1,1366)       1:A:89:VAL:HA       1:A:63:PRO:HG3       25       0.19         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HD3       5       0.19	(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH21	27	0.19
(1,1463)       1:A:38:PRO:HD2       1:A:31:LYS:HD3       19       0.19         (1,1366)       1:A:89:VAL:HA       1:A:63:PRO:HG3       25       0.19         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HD3       5       0.19	(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH22	27	0.19
(1,1366)       1:A:89:VAL:HA       1:A:63:PRO:HG3       25       0.19         (1,1351)       1:A:89:VAL:HG11       1:A:63:PRO:HD3       5       0.19	(1,1463)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD3	1	0.19
(1,1351) 1:A:89:VAL:HG11 1:A:63:PRO:HD3 5 0.19	(1,1463)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD3	19	0.19
	(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	25	0.19
(1,1351) 1:A:89:VAL:HG12 1:A:63:PRO:HD3 5 0.19	(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	5	0.19
	(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	5	0.19



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	5	0.19
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	16	0.19
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	16	0.19
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	16	0.19
(1,1182)	1:A:117:LYS:HG2	1:A:117:LYS:HE3	4	0.19
(1,1182)	1:A:117:LYS:HG2	1:A:117:LYS:HE3	29	0.19
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	3	0.19
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	3	0.19
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	3	0.19
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	12	0.19
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	12	0.19
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	12	0.19
(1,997)	1:A:12:GLN:HA	1:A:12:GLN:HG3	10	0.18
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	22	0.18
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	22	0.18
(1,315)	1:A:36:GLU:HG3	1:A:36:GLU:HA	13	0.18
(1,194)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:6:SER:HB2	30	0.18
(1,194)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:6:SER:HB2	30	0.18
(1,1607)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:8:THR:HA	20	0.18
(1,1607)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:8:THR:HA	20	0.18
(1,1607)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:8:THR:HA	20	0.18
(1,1607)	1:A:8:THR:HA	1:A:120:ILE:HD11	20	0.18
(1,1607)	1:A:8:THR:HA	1:A:120:ILE:HD12	20	0.18
(1,1607)	1:A:8:THR:HA	1:A:120:ILE:HD13	20	0.18
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	15	0.18
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	15	0.18
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	18	0.18
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	18	0.18
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	18	0.18
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	18	0.18
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	26	0.18
(1,1483)	1:A:111:ASN:HD22	1:A:110:LYS:HE2	9	0.18
(1,1483)	1:A:111:ASN:HD22	1:A:110:LYS:HE3	9	0.18
(1,1463)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD3	10	0.18
(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD11	25	0.18
(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD12	25	0.18
(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD13	25	0.18
(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD11	25	0.18
(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD12	25	0.18
(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD13	25	0.18
(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD11	25	0.18
(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD12	25	0.18



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

(1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         25         0.18           (1,1351)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HD3         11         0.18           (1,1351)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HD3         11         0.18           (1,1351)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HD3         14         0.18           (1,1351)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HD3         14         0.18           (1,1351)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HD3         14         0.18           (1,1351)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HD3         14         0.18           (1,1351)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HD3         14         0.18           (1,1126)         1:A:5:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HD3         14         0.18           (1,1126)         1:A:5:VAL:H         1:A:4:THR:HG21         2         0.18           (1,1126)         1:A:5:VAL:H         1:A:4:THR:HG22         2         0.18           (1,1076)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:71:GLN:HE22         17         0.18           (1,1076)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:71:GLN:HE22         17         0.18           (1,991)         1:A:62:GLY:HA2         1	
(1,1351)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HD3         11         0.18           (1,1351)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HD3         11         0.18           (1,1351)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HD3         14         0.18           (1,1351)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HD3         14         0.18           (1,1351)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HD3         14         0.18           (1,1351)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HD3         14         0.18           (1,1182)         1:A:117:LYS:HG2         1:A:117:LYS:HE3         24         0.18           (1,1126)         1:A:5:VAL:H         1:A:4:THR:HG21         2         0.18           (1,1126)         1:A:5:VAL:H         1:A:4:THR:HG23         2         0.18           (1,1076)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:71:GLN:HE22         17         0.18           (1,1076)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:71:GLN:HE22         17         0.18           (1,991)         1:A:3:PHE:H         1:A:63:PRO:HD2         17         0.17           (1,897)         1:A:84:GLU:H         1:A:83:THR:HG21         25         0.17           (1,897)         1:A:84:GLU:H         1:A:83:TH	
(1,1351)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HD3         11         0.18           (1,1351)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HD3         14         0.18           (1,1351)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HD3         14         0.18           (1,1351)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HD3         14         0.18           (1,1351)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HD3         14         0.18           (1,1182)         1:A:117:LYS:HG2         1:A:117:LYS:HE3         24         0.18           (1,1126)         1:A:5:VAL:H         1:A:4:THR:HG21         2         0.18           (1,1126)         1:A:5:VAL:H         1:A:4:THR:HG23         2         0.18           (1,1076)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:71:GLN:HE22         17         0.18           (1,1076)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:71:GLN:HE22         17         0.18           (1,1076)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:71:GLN:HE22         17         0.18           (1,991)         1:A:3:PHE:H         1:A:63:PRO:HD2         17         0.17           (1,897)         1:A:84:GLU:H         1:A:83:THR:HG21         25         0.17           (1,897)         1:A:84:GLU:H         1:A:83:TH	
(1,1351)         1:A:89:VAL:HG11         1:A:63:PRO:HD3         14         0.18           (1,1351)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HD3         14         0.18           (1,1351)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HD3         14         0.18           (1,1182)         1:A:117:LYS:HG2         1:A:117:LYS:HE3         24         0.18           (1,1126)         1:A:5:VAL:H         1:A:4:THR:HG21         2         0.18           (1,1126)         1:A:5:VAL:H         1:A:4:THR:HG22         2         0.18           (1,1076)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:71:GLN:HE22         17         0.18           (1,1076)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:71:GLN:HE22         17         0.18           (1,1076)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:71:GLN:HE22         17         0.18           (1,991)         1:A:3:PHE:H         1:A:63:PRO:HD2         17         0.17           (1,897)         1:A:84:GLU:H         1:A:83:THR:HG21         25         0.17           (1,897)         1:A:84:GLU:H         1:A:83:THR:HG23         25         0.17           (1,548)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:61:GLU:HG3         1         0.17	
(1,1351)         1:A:89:VAL:HG12         1:A:63:PRO:HD3         14         0.18           (1,1351)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HD3         14         0.18           (1,1182)         1:A:117:LYS:HG2         1:A:117:LYS:HE3         24         0.18           (1,1126)         1:A:5:VAL:H         1:A:4:THR:HG21         2         0.18           (1,1126)         1:A:5:VAL:H         1:A:4:THR:HG22         2         0.18           (1,1026)         1:A:5:VAL:H         1:A:4:THR:HG23         2         0.18           (1,1076)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:71:GLN:HE22         17         0.18           (1,1076)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:71:GLN:HE22         17         0.18           (1,991)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:71:GLN:HE22         17         0.18           (1,991)         1:A:3:PHE:H         1:A:2:GLU:HA         14         0.17           (1,897)         1:A:84:GLU:H         1:A:83:THR:HG21         25         0.17           (1,897)         1:A:84:GLU:H         1:A:83:THR:HG23         25         0.17           (1,548)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:61:GLU:HG3         1         0.17	
(1,1351)         1:A:89:VAL:HG13         1:A:63:PRO:HD3         14         0.18           (1,1182)         1:A:117:LYS:HG2         1:A:117:LYS:HE3         24         0.18           (1,1126)         1:A:5:VAL:H         1:A:4:THR:HG21         2         0.18           (1,1126)         1:A:5:VAL:H         1:A:4:THR:HG22         2         0.18           (1,1126)         1:A:5:VAL:H         1:A:4:THR:HG23         2         0.18           (1,1076)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:71:GLN:HE22         17         0.18           (1,1076)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:71:GLN:HE22         17         0.18           (1,1076)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:71:GLN:HE22         17         0.18           (1,991)         1:A:3:PHE:H         1:A:2:GLU:HA         14         0.17           (1,920)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         17         0.17           (1,897)         1:A:84:GLU:H         1:A:83:THR:HG21         25         0.17           (1,897)         1:A:84:GLU:H         1:A:83:THR:HG23         25         0.17           (1,548)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:61:GLU:HG3         1         0.17	
(1,1182)         1:A:117:LYS:HG2         1:A:117:LYS:HE3         24         0.18           (1,1126)         1:A:5:VAL:H         1:A:4:THR:HG21         2         0.18           (1,1126)         1:A:5:VAL:H         1:A:4:THR:HG22         2         0.18           (1,1126)         1:A:5:VAL:H         1:A:71:GLN:HG23         2         0.18           (1,1076)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:71:GLN:HE22         17         0.18           (1,1076)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:71:GLN:HE22         17         0.18           (1,1076)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:71:GLN:HE22         17         0.18           (1,991)         1:A:3:PHE:H         1:A:2:GLU:HA         14         0.17           (1,990)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         17         0.17           (1,897)         1:A:84:GLU:H         1:A:83:THR:HG21         25         0.17           (1,897)         1:A:84:GLU:H         1:A:83:THR:HG23         25         0.17           (1,548)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:61:GLU:HG3         1         0.17	
(1,1126)         1:A:5:VAL:H         1:A:4:THR:HG21         2         0.18           (1,1126)         1:A:5:VAL:H         1:A:4:THR:HG22         2         0.18           (1,1126)         1:A:5:VAL:H         1:A:4:THR:HG23         2         0.18           (1,1076)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:71:GLN:HE22         17         0.18           (1,1076)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:71:GLN:HE22         17         0.18           (1,1076)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:71:GLN:HE22         17         0.18           (1,991)         1:A:3:PHE:H         1:A:2:GLU:HA         14         0.17           (1,920)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         17         0.17           (1,897)         1:A:84:GLU:H         1:A:83:THR:HG21         25         0.17           (1,897)         1:A:84:GLU:H         1:A:83:THR:HG23         25         0.17           (1,548)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:61:GLU:HG3         1         0.17	
(1,1126)         1:A:5:VAL:H         1:A:4:THR:HG22         2         0.18           (1,1126)         1:A:5:VAL:H         1:A:4:THR:HG23         2         0.18           (1,1076)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:71:GLN:HE22         17         0.18           (1,1076)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:71:GLN:HE22         17         0.18           (1,1076)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:71:GLN:HE22         17         0.18           (1,991)         1:A:3:PHE:H         1:A:2:GLU:HA         14         0.17           (1,920)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD2         17         0.17           (1,897)         1:A:84:GLU:H         1:A:83:THR:HG21         25         0.17           (1,897)         1:A:84:GLU:H         1:A:83:THR:HG23         25         0.17           (1,548)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:61:GLU:HG3         1         0.17	
(1,1126)       1:A:5:VAL:H       1:A:4:THR:HG23       2       0.18         (1,1076)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:71:GLN:HE22       17       0.18         (1,1076)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:71:GLN:HE22       17       0.18         (1,1076)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:71:GLN:HE22       17       0.18         (1,991)       1:A:3:PHE:H       1:A:2:GLU:HA       14       0.17         (1,920)       1:A:62:GLY:HA2       1:A:63:PRO:HD2       17       0.17         (1,897)       1:A:84:GLU:H       1:A:83:THR:HG21       25       0.17         (1,897)       1:A:84:GLU:H       1:A:83:THR:HG22       25       0.17         (1,897)       1:A:84:GLU:H       1:A:83:THR:HG23       25       0.17         (1,548)       1:A:61:GLU:HB3       1:A:61:GLU:HG3       1       0.17	
(1,1076)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:71:GLN:HE22       17       0.18         (1,1076)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:71:GLN:HE22       17       0.18         (1,1076)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:71:GLN:HE22       17       0.18         (1,991)       1:A:3:PHE:H       1:A:2:GLU:HA       14       0.17         (1,920)       1:A:62:GLY:HA2       1:A:63:PRO:HD2       17       0.17         (1,897)       1:A:84:GLU:H       1:A:83:THR:HG21       25       0.17         (1,897)       1:A:84:GLU:H       1:A:83:THR:HG22       25       0.17         (1,897)       1:A:84:GLU:H       1:A:83:THR:HG23       25       0.17         (1,548)       1:A:61:GLU:HB3       1:A:61:GLU:HG3       1       0.17	
(1,1076)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:71:GLN:HE22       17       0.18         (1,1076)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:71:GLN:HE22       17       0.18         (1,991)       1:A:3:PHE:H       1:A:2:GLU:HA       14       0.17         (1,920)       1:A:62:GLY:HA2       1:A:63:PRO:HD2       17       0.17         (1,897)       1:A:84:GLU:H       1:A:83:THR:HG21       25       0.17         (1,897)       1:A:84:GLU:H       1:A:83:THR:HG22       25       0.17         (1,897)       1:A:84:GLU:H       1:A:83:THR:HG23       25       0.17         (1,548)       1:A:61:GLU:HB3       1:A:61:GLU:HG3       1       0.17	
(1,1076)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:71:GLN:HE22       17       0.18         (1,991)       1:A:3:PHE:H       1:A:2:GLU:HA       14       0.17         (1,920)       1:A:62:GLY:HA2       1:A:63:PRO:HD2       17       0.17         (1,897)       1:A:84:GLU:H       1:A:83:THR:HG21       25       0.17         (1,897)       1:A:84:GLU:H       1:A:83:THR:HG22       25       0.17         (1,897)       1:A:84:GLU:H       1:A:83:THR:HG23       25       0.17         (1,548)       1:A:61:GLU:HB3       1:A:61:GLU:HG3       1       0.17	
(1,991)       1:A:3:PHE:H       1:A:2:GLU:HA       14       0.17         (1,920)       1:A:62:GLY:HA2       1:A:63:PRO:HD2       17       0.17         (1,897)       1:A:84:GLU:H       1:A:83:THR:HG21       25       0.17         (1,897)       1:A:84:GLU:H       1:A:83:THR:HG22       25       0.17         (1,897)       1:A:84:GLU:H       1:A:83:THR:HG23       25       0.17         (1,548)       1:A:61:GLU:HB3       1:A:61:GLU:HG3       1       0.17	
(1,920)       1:A:62:GLY:HA2       1:A:63:PRO:HD2       17       0.17         (1,897)       1:A:84:GLU:H       1:A:83:THR:HG21       25       0.17         (1,897)       1:A:84:GLU:H       1:A:83:THR:HG22       25       0.17         (1,897)       1:A:84:GLU:H       1:A:83:THR:HG23       25       0.17         (1,548)       1:A:61:GLU:HB3       1:A:61:GLU:HG3       1       0.17	
(1,897)       1:A:84:GLU:H       1:A:83:THR:HG21       25       0.17         (1,897)       1:A:84:GLU:H       1:A:83:THR:HG22       25       0.17         (1,897)       1:A:84:GLU:H       1:A:83:THR:HG23       25       0.17         (1,548)       1:A:61:GLU:HB3       1:A:61:GLU:HG3       1       0.17	
(1,897)       1:A:84:GLU:H       1:A:83:THR:HG21       25       0.17         (1,897)       1:A:84:GLU:H       1:A:83:THR:HG22       25       0.17         (1,897)       1:A:84:GLU:H       1:A:83:THR:HG23       25       0.17         (1,548)       1:A:61:GLU:HB3       1:A:61:GLU:HG3       1       0.17	
(1,897)       1:A:84:GLU:H       1:A:83:THR:HG23       25       0.17         (1,548)       1:A:61:GLU:HB3       1:A:61:GLU:HG3       1       0.17	
(1,548) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:61:GLU:HG3 1 0.17	
(4.7.10)	
(1,548)   1:A:61:GLU:HB3   1:A:61:GLU:HG3   2   0.17	
(1,548) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:61:GLU:HG3 3 0.17	
(1,548) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:61:GLU:HG3 4 0.17	
(1,548) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:61:GLU:HG3 5 0.17	
(1,548) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:61:GLU:HG3 7 0.17	
(1,548) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:61:GLU:HG3 8 0.17	
(1,548) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:61:GLU:HG3 9 0.17	
(1,548) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:61:GLU:HG3 10 0.17	
(1,548) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:61:GLU:HG3 11 0.17	
(1,548) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:61:GLU:HG3 12 0.17	
(1,548) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:61:GLU:HG3 13 0.17	
(1,548) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:61:GLU:HG3 14 0.17	
(1,548) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:61:GLU:HG3 15 0.17	
(1,548) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:61:GLU:HG3 16 0.17	
(1,548) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:61:GLU:HG3 17 0.17	
(1,548) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:61:GLU:HG3 18 0.17	
(1,548) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:61:GLU:HG3 19 0.17	
(1,548) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:61:GLU:HG3 20 0.17	
(1,548) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:61:GLU:HG3 21 0.17	
(1,548) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:61:GLU:HG3 24 0.17	
(1,548) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:61:GLU:HG3 26 0.17	
(1,548) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:61:GLU:HG3 27 0.17	



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	28	0.17
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	29	0.17
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	30	0.17
(1,433)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD3	9	0.17
(1,352)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB2	16	0.17
(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	2	0.17
(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	28	0.17
(1,287)	1:A:84:GLU:H	1:A:84:GLU:HG3	2	0.17
(1,287)	1:A:84:GLU:H	1:A:84:GLU:HG3	30	0.17
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	2	0.17
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	3	0.17
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	4	0.17
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	5	0.17
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	6	0.17
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	9	0.17
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	11	0.17
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	12	0.17
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	14	0.17
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	15	0.17
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	22	0.17
(1,169)	1:A:3:PHE:H	1:A:2:GLU:HB2	8	0.17
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	20	0.17
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	20	0.17
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	20	0.17
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	20	0.17
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH11	29	0.17
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH12	29	0.17
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH21	29	0.17
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH22	29	0.17
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	12	0.17
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	13	0.17
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	19	0.17
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	19	0.17
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	19	0.17
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	26	0.17
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	26	0.17
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	26	0.17
(1,1182)	1:A:117:LYS:HG2	1:A:117:LYS:HE3	21	0.17
(1,1182)	1:A:117:LYS:HG2	1:A:117:LYS:HE3	30	0.17
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	18	0.17
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	18	0.17
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	18	0.17



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG21	1	0.17
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG22	1	0.17
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG23	1	0.17
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	22	0.17
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	22	0.17
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	22	0.17
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	11	0.17
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	4	0.17
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	4	0.17
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	4	0.17
(1,885)	1:A:28:TYR:H	1:A:28:TYR:HD1	21	0.16
(1,885)	1:A:28:TYR:H	1:A:28:TYR:HD2	21	0.16
(1,87)	1:A:69:VAL:HA	1:A:69:VAL:HG11	1	0.16
(1,87)	1:A:69:VAL:HA	1:A:69:VAL:HG12	1	0.16
(1,87)	1:A:69:VAL:HA	1:A:69:VAL:HG13	1	0.16
(1,87)	1:A:69:VAL:HA	1:A:69:VAL:HG21	1	0.16
(1,87)	1:A:69:VAL:HA	1:A:69:VAL:HG22	1	0.16
(1,87)	1:A:69:VAL:HA	1:A:69:VAL:HG23	1	0.16
(1,59)	1:A:101:ALA:HB1	1:A:48:LYS:HG2	20	0.16
(1,59)	1:A:101:ALA:HB1	1:A:48:LYS:HG3	20	0.16
(1,59)	1:A:101:ALA:HB2	1:A:48:LYS:HG2	20	0.16
(1,59)	1:A:101:ALA:HB2	1:A:48:LYS:HG3	20	0.16
(1,59)	1:A:101:ALA:HB3	1:A:48:LYS:HG2	20	0.16
(1,59)	1:A:101:ALA:HB3	1:A:48:LYS:HG3	20	0.16
(1,565)	1:A:43:THR:HG21	1:A:38:PRO:HD3	19	0.16
(1,565)	1:A:43:THR:HG22	1:A:38:PRO:HD3	19	0.16
(1,565)	1:A:43:THR:HG23	1:A:38:PRO:HD3	19	0.16
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	6	0.16
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	22	0.16
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	23	0.16
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	25	0.16
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	8	0.16
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	12	0.16
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	13	0.16
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	30	0.16
(1,174)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:91:LYS:HG2	5	0.16
(1,174)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:91:LYS:HG2	12	0.16
(1,174)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:91:LYS:HG2	24	0.16
(1,174)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:91:LYS:HG2	25	0.16
(1,174)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:91:LYS:HG2	26	0.16
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	28	0.16
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	28	0.16



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	28	0.16
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	28	0.16
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH11	6	0.16
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH12	6	0.16
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH21	6	0.16
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH22	6	0.16
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	5	0.16
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	21	0.16
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	23	0.16
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	6	0.16
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	6	0.16
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	6	0.16
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	15	0.16
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	15	0.16
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	15	0.16
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	17	0.16
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	17	0.16
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	17	0.16
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	13	0.16
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	13	0.16
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	13	0.16
(1,991)	1:A:3:PHE:H	1:A:2:GLU:HA	24	0.15
(1,521)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:103:ARG:HA	20	0.15
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	1	0.15
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	16	0.15
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	26	0.15
(1,352)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB2	2	0.15
(1,352)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB2	20	0.15
(1,287)	1:A:84:GLU:H	1:A:84:GLU:HG3	9	0.15
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	26	0.15
(1,174)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:91:LYS:HG2	10	0.15
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	19	0.15
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	19	0.15
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	21	0.15
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	21	0.15
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	23	0.15
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	23	0.15
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	23	0.15
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	23	0.15
(1,1547)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:38:PRO:HD2	14	0.15
(1,1547)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB2	14	0.15
(1,1463)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD3	14	0.15



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1393)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD2	29	0.15
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	3	0.15
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	3	0.15
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	3	0.15
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	13	0.15
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	13	0.15
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	13	0.15
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	18	0.15
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	18	0.15
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	18	0.15
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	7	0.15
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	7	0.15
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	7	0.15
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	14	0.15
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	14	0.15
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	14	0.15
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	18	0.15
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	18	0.15
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	18	0.15
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	21	0.15
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	21	0.15
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	21	0.15
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	29	0.15
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	29	0.15
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	29	0.15
(1,988)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HG2	5	0.14
(1,988)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HG2	24	0.14
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	7	0.14
(1,699)	1:A:77:ASP:HB3	1:A:80:GLU:HB2	22	0.14
(1,699)	1:A:77:ASP:HB3	1:A:80:GLU:HB3	22	0.14
(1,565)	1:A:43:THR:HG21	1:A:38:PRO:HD3	16	0.14
(1,565)	1:A:43:THR:HG22	1:A:38:PRO:HD3	16	0.14
(1,565)	1:A:43:THR:HG23	1:A:38:PRO:HD3	16	0.14
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	18	0.14
(1,194)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:6:SER:HB2	15	0.14
(1,194)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:6:SER:HB2	15	0.14
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:20:SER:HB2	6	0.14
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:20:SER:HB3	6	0.14
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:20:SER:HB2	6	0.14
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:20:SER:HB3	6	0.14
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:20:SER:HB2	6	0.14
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:20:SER:HB3	6	0.14



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

(1,1547)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:38:PRO:HD2         11         0.14           (1,1547)         1:A:31:LYS:HA         1:A:36:GLU:HB2         11         0.14           (1,1533)         1:A:9:GLU:HA         1:A:48:LYS:HG2         14         0.14           (1,1482)         1:A:48:LYS:H         1:A:48:LYS:HG3         4         0.14           (1,1482)         1:A:48:LYS:H         1:A:48:LYS:HG3         4         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HH11         1         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HH21         1         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HD2         1         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HD12         1         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HD12         3         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1533)         1:A:9:GLU:HA         1:A:48:LYS:H         1:A:48:LYS:HG2         4         0.14           (1,1482)         1:A:48:LYS:H         1:A:48:LYS:HG2         4         0.14           (1,1482)         1:A:48:LYS:H         1:A:48:LYS:HG3         4         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HH11         1         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HH12         1         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HH12         1         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HH11         3         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HH11         3         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HH21         3         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HH21         3         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HH22         3         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HH22         3         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG11         6         0.14           (1,1178)         <	(1,1547)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:38:PRO:HD2	11	0.14
1:A:48:LYS:H	(1,1547)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB2	11	0.14
(1,1482) 1:A:48:LYS:H 1:A:48:LYS:HG3 4 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH11 1 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH12 1 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH11 3 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH11 3 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH12 3 0.14 (1,1178) 1:A:90:ASP:H 1:A:89:VAL:HG11 6 0.14 (1,1178) 1:A:90:ASP:H 1:A:89:VAL:HG11 6 0.14 (1,1178) 1:A:90:ASP:H 1:A:89:VAL:HG11 6 0.14 (1,1178) 1:A:90:ASP:H 1:A:89:VAL:HG13 6 0.14 (1,1178) 1:A:90:ASP:H 1:A:89:VAL:HG13 2 0.14 (1,1178) 1:A:90:ASP:H 1:A:89:VAL:HG13 22 0.14 (1,1178) 1:A:90:ASP:H 1:A:123:ASP:HB2 25 0.13 (1,433) 1:A:62:GLN:Ha2 1:A:63:PRO:HD3 1 0.13 (1,437) 1:A:76:ARG:HA 1:A:76:ARG:HG3 27 0.13 (1,551) 1:A:57:PHE:HB2 1:A:43:THE:H 1:A:40:ASP:OD1 17 0.13 (1,1571) 1:A:57:PHE:HB3 1:A:51:PHE:HB2 5 0.13 (1,1571) 1:A:57:PHE:HB3 1:A:19:HBB3 5 0.13 (1,1571) 1:A:57:PHE:HB3 1:A:48:LYS:H 1:A:48:LYS:HG3 5 0.13 (1,1447) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 19 0.13 (1,1447) 1:A:16:THR:HG21 1:A:20:SER:HB3 2 0.13 (1,1447) 1:A:16:THR:HG22 1:A:17:GLU:HA 19 0.13 (1,1447) 1:A:16:THR:HG22 1:A:17:GLU:HA 19 0.13 (1,1482) 1:A:16:THR:HG22 1:A:20:SER:HB3 2 0.13 (1,1382) 1:A:16:THR:HG22 1:A:20:SER:HB3 2 0.13 (1,1382) 1:A:16:THR:HG22 1:A:20:SER:HB3 2 0.13 (1,1382) 1:A:16:T	(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	14	0.14
(1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH11 1 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH12 1 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH21 1 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH21 1 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH11 3 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH11 3 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH11 3 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH12 3 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH12 3 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH22 3 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH22 3 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH22 3 0.14 (1,1178) 1:A:90:ASP:H 1:A:89:VAL:HG11 6 0.14 (1,1178) 1:A:90:ASP:H 1:A:89:VAL:HG11 6 0.14 (1,1178) 1:A:90:ASP:H 1:A:89:VAL:HG12 6 0.14 (1,1178) 1:A:90:ASP:H 1:A:89:VAL:HG13 6 0.14 (1,1178) 1:A:90:ASP:H 1:A:89:VAL:HG13 22 0.14 (1,1178) 1:A:10:ASP:H 1:A:12:GLN:HG2 3 0.13 (1,433) 1:A:62:GLY:HA2 1:A:63:PRO:HD3 1 0.13 (1,433) 1:A:62:GLY:HA2 1:A:63:PRO:HD3 1 0.13 (1,437) 1:A:76:ARG:HA 1:A:76:ARG:HG3 27 0.13 (1,352) 1:A:123:ASP:H 1:A:123:ASP:HB2 25 0.13 (1,1571) 1:A:57:PHE:HB2 1:A:51:PHE:HB3 5 0.13 (1,1571) 1:A:57:PHE:HB2 1:A:51:PHE:HB3 5 0.13 (1,1571) 1:A:57:PHE:HB3 1:A:51:PHE:HB3 5 0.13 (1,1571) 1:A:57:PHE:HB3 1:A:51:PHE:HB3 5 0.13 (1,1571) 1:A:57:PHE:HB3 1:A:51:PHE:HB3 5 0.13 (1,1482) 1:A:48:LYS:H 1:A:48:LYS:H 1:A:48:LYS:H 19 0.13 (1,1447) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 19 0.13 (1,1447) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 19 0.13 (1,1447) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 19 0.13 (1,1382) 1:A:16:THR:HG22 1:A:20:SER:HB3 2 0.13 (1,1382) 1:A:16:THR:HG23 1:A:20:SER:HB3 2 0.13 (1,1367) 1:A:54:MET:HE1 1:A:11:LEU:HD11 10 0.13 (1,1367) 1:A:54:MET	(1,1482)	1:A:48:LYS:H	1:A:48:LYS:HG2	4	0.14
(1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH12 1 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HD2 1 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH21 1 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH11 3 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH11 3 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH11 3 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH12 3 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH21 3 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH21 3 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH21 3 0.14 (1,1178) 1:A:90:ASP:H 1:A:89:VAL:HG11 6 0.14 (1,1178) 1:A:90:ASP:H 1:A:89:VAL:HG11 6 0.14 (1,1178) 1:A:90:ASP:H 1:A:89:VAL:HG12 6 0.14 (1,1178) 1:A:90:ASP:H 1:A:89:VAL:HG13 6 0.14 (1,1178) 1:A:90:ASP:H 1:A:89:VAL:HG13 22 0.14 (1,1178) 1:A:62:GLN:H 1:A:12:GLN:HG2 3 0.13 (1,407) 1:A:62:GLN:H 1:A:12:GLN:HG2 3 0.13 (1,407) 1:A:76:ARG:HA 1:A:76:ARG:HG3 27 0.13 (1,352) 1:A:123:ASP:H 1:A:123:ASP:HB2 25 0.13 (1,1618) 1:A:43:THR:H 1:A:40:ASP:OD1 17 0.13 (1,1571) 1:A:57:PHE:HB2 1:A:51:PHE:HB2 5 0.13 (1,1571) 1:A:57:PHE:HB2 1:A:51:PHE:HB3 5 0.13 (1,1571) 1:A:57:PHE:HB3 1:A:51:PHE:HB3 5 0.13 (1,1482) 1:A:48:LYS:H 1:A:48:LYS:H 1:A:48:LYS:HG3 15 0.13 (1,1447) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 19 0.13 (1,1447) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 19 0.13 (1,1382) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 19 0.13 (1,1382) 1:A:16:THR:HG21 1:A:20:SER:HB2 2 0.13 (1,1382) 1:A:16:THR:HG21 1:A:20:SER:HB3 2 0.13 (1,1382) 1:A:16:THR:HG22 1:A:20:SER:HB3 2 0.13 (1,1382) 1:A:16:THR:HG21 1:A:20:SER:HB3 2 0.13 (1,1382) 1:A:16:THR:HG21 1:A:20:SER:HB3 2 0.13 (1,1382) 1:A:16:THR:HG22 1:A:20:SER:HB3 2 0.13 (1,1367) 1:A:54:MET:HE1 1:A:11:LEU:HD11 10 0.13 (1,1367) 1:A:54:MET:H	(1,1482)	1:A:48:LYS:H	1:A:48:LYS:HG3	4	0.14
(1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HH21         1         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HH22         1         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HH11         3         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HH12         3         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HH12         3         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HH12         3         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HH22         3         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HH22         3         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HH22         3         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:14         1.14         0.14         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:143         0.14         0.14         0.14         0.14         0.14         0.14         0.14         0.14         0.14         0.14         0.14         0.14         0.14         0.14         0.14         0.14         0.14         0.14 <t< td=""><td>(1,1413)</td><td>1:A:103:ARG:HD3</td><td>1:A:103:ARG:HH11</td><td>1</td><td>0.14</td></t<>	(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH11	1	0.14
(1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HH22         1         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HH11         3         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HH21         3         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HB21         3         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HB22         3         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG11         6         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG12         6         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG13         6         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG12         22         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG13         22         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG13         22         0.14           (1,1178)         1:A:12:GLN:H         1:A:12:GLN:HG2         3         0.13           (1,407)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD3         1         0.13           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:A	(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH12	1	0.14
(1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH11 3 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH12 3 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH21 3 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH21 3 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH22 3 0.14 (1,1413) 1:A:103:ARG:HD3 1:A:103:ARG:HH22 3 0.14 (1,1178) 1:A:90:ASP:H 1:A:89:VAL:HG11 6 0.14 (1,1178) 1:A:90:ASP:H 1:A:89:VAL:HG12 6 0.14 (1,1178) 1:A:90:ASP:H 1:A:89:VAL:HG13 6 0.14 (1,1178) 1:A:90:ASP:H 1:A:89:VAL:HG13 2 0.14 (1,1178) 1:A:90:ASP:H 1:A:89:VAL:HG13 2 0.14 (1,1178) 1:A:90:ASP:H 1:A:89:VAL:HG13 22 0.14 (1,988) 1:A:12:GLN:H 1:A:12:GLN:HG2 3 0.13 (1,433) 1:A:62:GLY:HA2 1:A:63:PRO:HD3 1 0.13 (1,407) 1:A:76:ARG:HA 1:A:76:ARG:HA3 1 0.13 (1,457) 1:A:76:ARG:HA 1:A:76:ARG:HB3 27 0.13 (1,352) 1:A:123:ASP:H 1:A:123:ASP:HB2 25 0.13 (1,1571) 1:A:57:PHE:HB2 1:A:51:PHE:HB2 5 0.13 (1,1571) 1:A:57:PHE:HB2 1:A:51:PHE:HB3 5 0.13 (1,1571) 1:A:57:PHE:HB2 1:A:51:PHE:HB3 5 0.13 (1,1571) 1:A:57:PHE:HB3 1:A:51:PHE:HB3 5 0.13 (1,1482) 1:A:48:LYS:H 1:A:48:LYS:HG3 15 0.13 (1,1447) 1:A:6:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 19 0.13 (1,1447) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 19 0.13 (1,1447) 1:A:16:THR:HG21 1:A:17:GLU:HA 19 0.13 (1,1382) 1:A:16:THR:HG21 1:A:20:SER:HB2 2 0.13 (1,1382) 1:A:16:THR:HG21 1:A:20:SER:HB3 2 0.13 (1,1382) 1:A:16:THR:HG23 1:A:20:SER:HB3 2 0.13 (1,1367) 1:A:54:MET:HE1 1:A:11:LEU:HD11 10 0.1	(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH21	1	0.14
(1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HH12         3         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HH21         3         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HH22         3         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG11         6         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG12         6         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG13         2         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG12         22         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG13         22         0.14           (1,198)         1:A:12:GLN:H         1:A:12:GLN:HG2         3         0.13           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:63:PRO:HD3         1         0.13           (1,407)         1:A:173:ASP:HB:HB2         25	(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH22	1	0.14
(1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HH21         3         0.14           (1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HH22         3         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG11         6         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG12         6         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG13         6         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG12         22         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG13         22         0.14           (1,1178)         1:A:6:CLY:HA2         1:A:63:PRO:HB3         1         0.13           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HB3<	(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH11	3	0.14
(1,1413)         1:A:103:ARG:HD3         1:A:103:ARG:HH22         3         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG11         6         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG12         6         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG13         6         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG11         22         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG12         22         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG13         22         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG13         22         0.14           (1,1988)         1:A:12:GEN:H         1:A:12:GEN:HG2         3         0.13           (1,4988)         1:A:12:GEN:H         1:A:63:PRO:HD3         1         0.13           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         27         0.13           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:16:ARG:HG3         27         0.13           (1,1571)         1:A:53:TPHE:HB2         1:A:13:TPHE:HB2         5         0.13           (1,1571)         1:A:55:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3	(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH12	3	0.14
(1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG11         6         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG12         6         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG13         6         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG11         22         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG12         22         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG13         22         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG13         22         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG13         22         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG12         22         0.14           (1,1178)         1:A:49:ASP:GIT         1:A:123:ASP:CIT         3         0.13           (1,498)         1:A:123:ASP:H         1:A:63:AFR:CIT         1         0.13           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         27         0.13           (1,1571)         1:A:76:ARG:HB         1:A:40:ASP:ODI         17         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2	(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH21	3	0.14
(1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG12         6         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG13         6         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG11         22         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG12         22         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG13         22         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG13         22         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG13         22         0.14           (1,1988)         1:A:12:GLN:H         1:A:12:GLN:HG2         3         0.13           (1,498)         1:A:123:ASP:H         1:A:63:PRO:HD3         1         0.13           (1,407)         1:A:6ARG:HA         1:A:63:PRO:HD3         1         0.13           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:63:PRO:HD3         1         0.13           (1,407)         1:A:6ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         27         0.13           (1,157)         1:A:67:PHE:HB2         1:A:123:ASP:HB2         25         0.13           (1,157)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3 <t< td=""><td>(1,1413)</td><td>1:A:103:ARG:HD3</td><td>1:A:103:ARG:HH22</td><td>3</td><td>0.14</td></t<>	(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH22	3	0.14
(1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG12         6         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG13         6         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG11         22         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG12         22         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG13         22         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG13         22         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG13         22         0.14           (1,1988)         1:A:12:GLN:H         1:A:12:GLN:HG2         3         0.13           (1,493)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD3         1         0.13           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:63:PRO:HD3         1         0.13           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         27         0.13           (1,352)         1:A:123:ASP:H         1:A:123:ASP:HB2         25         0.13           (1,1618)         1:A:43:TRR:H         1:A:40:ASP:OD1         17         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3	(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	6	0.14
(1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG11         22         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG12         22         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG13         22         0.14           (1,988)         1:A:12:GLN:H         1:A:12:GLN:HG2         3         0.13           (1,433)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD3         1         0.13           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         27         0.13           (1,352)         1:A:123:ASP:H         1:A:123:ASP:HB2         25         0.13           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         17         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         5         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         5         0.13           (1,1571)         1:A:48:LYS:H         1:A:48:LYS:HG2         15         0.13           (1,1482)         1:A:48:LYS:H         1:A:48:LYS:HG3         15         0.13           (1,1482)         1:A:48:LYS:H         1:A:48:LYS:HG3         15         0.13           (1,1447)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HA		1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	6	0.14
(1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG12         22         0.14           (1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG13         22         0.14           (1,988)         1:A:12:GLN:H         1:A:62:PRO:HD3         1         0.13           (1,433)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD3         1         0.13           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         27         0.13           (1,352)         1:A:123:ASP:H         1:A:123:ASP:HB2         25         0.13           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         17         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         5         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         5         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         5         0.13           (1,1571)         1:A:48:LYS:H         1:A:48:LYS:HG2         15         0.13           (1,1482)         1:A:48:LYS:H         1:A:48:LYS:HG2         15         0.13           (1,1482)         1:A:48:LYS:H         1:A:48:LYS:HG3         15         0.13           (1,1447)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HA	. ,	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	6	0.14
(1,1178)         1:A:90:ASP:H         1:A:89:VAL:HG13         22         0.14           (1,988)         1:A:12:GLN:H         1:A:12:GLN:HG2         3         0.13           (1,433)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD3         1         0.13           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         27         0.13           (1,352)         1:A:123:ASP:H         1:A:123:ASP:HB2         25         0.13           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         17         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         5         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         5         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         5         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         5         0.13           (1,1571)         1:A:48:LYS:H         1:A:48:LYS:HG2         15         0.13           (1,1482)         1:A:48:LYS:H         1:A:48:LYS:HG2         15         0.13           (1,1482)         1:A:48:LYS:H         1:A:48:LYS:HG3         15         0.13           (1,1447)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HA	(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	22	0.14
(1,988)         1:A:12:GLN:H         1:A:12:GLN:HG2         3         0.13           (1,433)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD3         1         0.13           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         27         0.13           (1,352)         1:A:123:ASP:H         1:A:123:ASP:HB2         25         0.13           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         17         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         5         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         5         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         5         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         5         0.13           (1,1482)         1:A:48:LYS:H         1:A:48:LYS:HG2         15         0.13           (1,1482)         1:A:48:LYS:H         1:A:48:LYS:HG3         15         0.13           (1,1447)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HA         19         0.13           (1,1447)         1:A:16:THR:HG22         1:A:17:GLU:HA         19         0.13           (1,1382)         1:A:16:THR:HG21         1:A:20:SER:HB3	(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	22	0.14
(1,433)         1:A:62:GLY:HA2         1:A:63:PRO:HD3         1         0.13           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         27         0.13           (1,352)         1:A:123:ASP:H         1:A:123:ASP:HB2         25         0.13           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         17         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         5         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         5         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         5         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         5         0.13           (1,1482)         1:A:48:LYS:H         1:A:48:LYS:HG2         15         0.13           (1,1482)         1:A:48:LYS:H         1:A:48:LYS:HG3         15         0.13           (1,1482)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HA         19         0.13           (1,1447)         1:A:16:THR:HG22         1:A:17:GLU:HA         19         0.13           (1,1382)         1:A:16:THR:HG21         1:A:20:SER:HB3         2         0.13           (1,1382)         1:A:16:THR:HG22         1:A:20:SER:HB3 </td <td>(1,1178)</td> <td>1:A:90:ASP:H</td> <td>1:A:89:VAL:HG13</td> <td>22</td> <td>0.14</td>	(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	22	0.14
(1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         27         0.13           (1,352)         1:A:123:ASP:H         1:A:123:ASP:HB2         25         0.13           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         17         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         5         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         5         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         5         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         5         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:48:LYS:H         1:A:48:LYS:HG2         15         0.13           (1,1482)         1:A:48:LYS:H         1:A:48:LYS:HG2         15         0.13           (1,1482)         1:A:48:LYS:H         1:A:48:LYS:HG3         15         0.13           (1,1447)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HA         19         0.13           (1,1382)         1:A:16:THR:HG23         1:A:17:GLU:HA         19         0.13           (1,1382)         1:A:16:THR:HG21         1:A:20:SER:HB3         2         0.13           (1,1382)         1:A:16:THR:HG22 </td <td>(1,988)</td> <td>1:A:12:GLN:H</td> <td>1:A:12:GLN:HG2</td> <td>3</td> <td>0.13</td>	(1,988)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HG2	3	0.13
(1,352)         1:A:123:ASP:H         1:A:123:ASP:HB2         25         0.13           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         17         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         5         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         5         0.13           (1,1482)         1:A:48:LYS:H         1:A:48:LYS:HG2         15         0.13           (1,1482)         1:A:48:LYS:H         1:A:48:LYS:HG3         15         0.13           (1,1447)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HA         19         0.13           (1,1447)         1:A:16:THR:HG23         1:A:17:GLU:HA         19         0.13           (1,1382)         1:A:16:THR:HG21         1:A:20:SER:HB2         2         0.13           (1,1382)         1:A:16:THR:HG21         1:A:20:SER:HB3         2         0.13           (1,1382)         1:A:16:THR:HG23         1:A:20:SER:HB	(1,433)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD3	1	0.13
(1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         17         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         5         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         5         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         5         0.13           (1,1571)         1:A:48:LYS:H         1:A:48:LYS:HG2         15         0.13           (1,1482)         1:A:48:LYS:H         1:A:48:LYS:HG3         15         0.13           (1,1482)         1:A:48:LYS:H         1:A:48:LYS:HG3         15         0.13           (1,1447)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HA         19         0.13           (1,1447)         1:A:16:THR:HG22         1:A:17:GLU:HA         19         0.13           (1,1447)         1:A:16:THR:HG23         1:A:17:GLU:HA         19         0.13           (1,1382)         1:A:16:THR:HG21         1:A:20:SER:HB2         2         0.13           (1,1382)         1:A:16:THR:HG21         1:A:20:SER:HB3         2         0.13           (1,1382)         1:A:16:THR:HG23         1:A:20:SER:HB3         2         0.13           (1,1382)         1:A:16:THR:HG23         1:A:20:SER:H	(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	27	0.13
(1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB2       5       0.13         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       5       0.13         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       5       0.13         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       5       0.13         (1,1571)       1:A:48:LYS:H       1:A:48:LYS:HG2       15       0.13         (1,1482)       1:A:48:LYS:H       1:A:48:LYS:HG3       15       0.13         (1,1482)       1:A:48:LYS:H       1:A:48:LYS:HG3       15       0.13         (1,1482)       1:A:48:LYS:H       1:A:48:LYS:HG3       15       0.13         (1,1447)       1:A:16:THR:HG21       1:A:17:GLU:HA       19       0.13         (1,1447)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HA       19       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG21       1:A:20:SER:HB2       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG22       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23 <t< td=""><td>(1,352)</td><td>1:A:123:ASP:H</td><td>1:A:123:ASP:HB2</td><td>25</td><td>0.13</td></t<>	(1,352)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB2	25	0.13
(1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       5       0.13         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       5       0.13         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       5       0.13         (1,1482)       1:A:48:LYS:H       1:A:48:LYS:HG2       15       0.13         (1,1482)       1:A:48:LYS:H       1:A:48:LYS:HG3       15       0.13         (1,1447)       1:A:16:THR:HG21       1:A:17:GLU:HA       19       0.13         (1,1447)       1:A:16:THR:HG22       1:A:17:GLU:HA       19       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB2       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG21       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG22       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1	(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	17	0.13
(1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         5         0.13           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         5         0.13           (1,1482)         1:A:48:LYS:H         1:A:48:LYS:HG2         15         0.13           (1,1482)         1:A:48:LYS:H         1:A:48:LYS:HG3         15         0.13           (1,1447)         1:A:16:THR:HG21         1:A:17:GLU:HA         19         0.13           (1,1447)         1:A:16:THR:HG22         1:A:17:GLU:HA         19         0.13           (1,1447)         1:A:16:THR:HG23         1:A:17:GLU:HA         19         0.13           (1,1382)         1:A:16:THR:HG21         1:A:20:SER:HB2         2         0.13           (1,1382)         1:A:16:THR:HG21         1:A:20:SER:HB3         2         0.13           (1,1382)         1:A:16:THR:HG22         1:A:20:SER:HB3         2         0.13           (1,1382)         1:A:16:THR:HG23         1:A:20:SER:HB3         2         0.13           (1,1382)         1:A:16:THR:HG23         1:A:20:SER:HB3         2         0.13           (1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD11         10         0.13           (1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	5	0.13
(1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       5       0.13         (1,1482)       1:A:48:LYS:H       1:A:48:LYS:HG2       15       0.13         (1,1482)       1:A:48:LYS:H       1:A:48:LYS:HG3       15       0.13         (1,1447)       1:A:16:THR:HG21       1:A:17:GLU:HA       19       0.13         (1,1447)       1:A:16:THR:HG22       1:A:17:GLU:HA       19       0.13         (1,1447)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HA       19       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG21       1:A:20:SER:HB2       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG21       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG22       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB2       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB2       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD11       10       0.13         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD12       10       0.13	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	5	0.13
(1,1482)       1:A:48:LYS:H       1:A:48:LYS:HG2       15       0.13         (1,1482)       1:A:48:LYS:H       1:A:48:LYS:HG3       15       0.13         (1,1447)       1:A:16:THR:HG21       1:A:17:GLU:HA       19       0.13         (1,1447)       1:A:16:THR:HG22       1:A:17:GLU:HA       19       0.13         (1,1447)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HA       19       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG21       1:A:20:SER:HB2       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG21       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG22       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD11       10       0.13         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD12       10       0.13	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	5	0.13
(1,1482)       1:A:48:LYS:H       1:A:48:LYS:HG3       15       0.13         (1,1447)       1:A:16:THR:HG21       1:A:17:GLU:HA       19       0.13         (1,1447)       1:A:16:THR:HG22       1:A:17:GLU:HA       19       0.13         (1,1447)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HA       19       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG21       1:A:20:SER:HB2       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG21       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG22       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD11       10       0.13         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD12       10       0.13	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	5	0.13
(1,1482)       1:A:48:LYS:H       1:A:48:LYS:HG3       15       0.13         (1,1447)       1:A:16:THR:HG21       1:A:17:GLU:HA       19       0.13         (1,1447)       1:A:16:THR:HG22       1:A:17:GLU:HA       19       0.13         (1,1447)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HA       19       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG21       1:A:20:SER:HB2       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG21       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG22       1:A:20:SER:HB2       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD11       10       0.13         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD12       10       0.13	(1,1482)	1:A:48:LYS:H	1:A:48:LYS:HG2	15	0.13
(1,1447)       1:A:16:THR:HG22       1:A:17:GLU:HA       19       0.13         (1,1447)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HA       19       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG21       1:A:20:SER:HB2       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG21       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG22       1:A:20:SER:HB2       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB2       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD11       10       0.13         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD12       10       0.13	(1,1482)	1:A:48:LYS:H	1:A:48:LYS:HG3	15	0.13
(1,1447)       1:A:16:THR:HG23       1:A:17:GLU:HA       19       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG21       1:A:20:SER:HB2       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG21       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG22       1:A:20:SER:HB2       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG22       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB2       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD11       10       0.13         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD12       10       0.13	(1,1447)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HA	19	0.13
(1,1382)       1:A:16:THR:HG21       1:A:20:SER:HB2       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG21       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG22       1:A:20:SER:HB2       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG22       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB2       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD11       10       0.13         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD12       10       0.13	(1,1447)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HA	19	0.13
(1,1382)       1:A:16:THR:HG21       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG22       1:A:20:SER:HB2       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG22       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB2       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD11       10       0.13         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD12       10       0.13	(1,1447)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HA	19	0.13
(1,1382)       1:A:16:THR:HG21       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG22       1:A:20:SER:HB2       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG22       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB2       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD11       10       0.13         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD12       10       0.13	· · /	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB2	2	0.13
(1,1382)       1:A:16:THR:HG22       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB2       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD11       10       0.13         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD12       10       0.13	· · /	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB3	2	0.13
(1,1382)       1:A:16:THR:HG22       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB2       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD11       10       0.13         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD12       10       0.13	(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB2	2	0.13
(1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB2       2       0.13         (1,1382)       1:A:16:THR:HG23       1:A:20:SER:HB3       2       0.13         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD11       10       0.13         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD12       10       0.13		1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB3	2	0.13
(1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD11       10       0.13         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD12       10       0.13	(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB2	2	0.13
(1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD11       10       0.13         (1,1367)       1:A:54:MET:HE1       1:A:11:LEU:HD12       10       0.13	(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB3	2	0.13
	(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD11	10	0.13
(1,1367) 1:A:54:MET:HE1 1:A:11:LEU:HD13 10 0.13	(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD12	10	0.13
	(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD13	10	0.13



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD11	10	0.13
(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD12	10	0.13
(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD13	10	0.13
(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD11	10	0.13
(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD12	10	0.13
(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD13	10	0.13
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	14	0.13
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	24	0.13
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	24	0.13
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	24	0.13
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	17	0.13
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	17	0.13
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	17	0.13
(1,1233)	1:A:14:TYR:HD1	1:A:54:MET:HG3	2	0.13
(1,1233)	1:A:14:TYR:HD2	1:A:54:MET:HG3	2	0.13
(1,12)	1:A:22:LEU:H	1:A:21:SER:HB2	6	0.13
(1,12)	1:A:22:LEU:H	1:A:21:SER:HB3	6	0.13
(1,12)	1:A:22:LEU:H	1:A:21:SER:HB2	9	0.13
(1,12)	1:A:22:LEU:H	1:A:21:SER:HB3	9	0.13
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG21	7	0.13
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG22	7	0.13
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG23	7	0.13
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	5	0.13
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	5	0.13
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	5	0.13
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	15	0.13
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	15	0.13
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	15	0.13
(1,1025)	1:A:64:LEU:H	1:A:64:LEU:HD21	12	0.13
(1,1025)	1:A:64:LEU:H	1:A:64:LEU:HD22	12	0.13
(1,1025)	1:A:64:LEU:H	1:A:64:LEU:HD23	12	0.13
(1,988)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HG2	25	0.12
(1,867)	1:A:103:ARG:HB3	1:A:103:ARG:H	16	0.12
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	25	0.12
(1,384)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:71:GLN:H	19	0.12
(1,289)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:107:CYS:H	23	0.12
(1,287)	1:A:84:GLU:H	1:A:84:GLU:HG3	28	0.12
(1,224)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:H	25	0.12
(1,224)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:H	25	0.12
(1,224)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:H	25	0.12
(1,194)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:6:SER:HB2	14	0.12
(1,194)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:6:SER:HB2	14	0.12



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,169)	1:A:3:PHE:H	1:A:2:GLU:HB2	28	0.12
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	7	0.12
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:20:SER:HB2	29	0.12
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:20:SER:HB3	29	0.12
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:20:SER:HB2	29	0.12
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:20:SER:HB3	29	0.12
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:20:SER:HB2	29	0.12
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:20:SER:HB3	29	0.12
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	3	0.12
(1,1515)	1:A:35:TRP:H	1:A:35:TRP:HD1	27	0.12
(1,1447)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HA	11	0.12
(1,1447)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HA	11	0.12
(1,1447)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HA	11	0.12
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	8	0.12
(1,1364)	1:A:20:SER:H	1:A:16:THR:HA	24	0.12
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	23	0.12
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	23	0.12
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	23	0.12
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	29	0.12
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	29	0.12
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	29	0.12
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	21	0.12
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	21	0.12
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	21	0.12
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	30	0.12
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	30	0.12
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	30	0.12
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG21	13	0.12
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG22	13	0.12
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG23	13	0.12
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG21	20	0.12
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG22	20	0.12
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG23	20	0.12
(1,1122)	1:A:14:TYR:HD1	1:A:11:LEU:HD11	29	0.12
(1,1122)	1:A:14:TYR:HD1	1:A:11:LEU:HD12	29	0.12
(1,1122)	1:A:14:TYR:HD1	1:A:11:LEU:HD13	29	0.12
(1,1122)	1:A:14:TYR:HD2	1:A:11:LEU:HD11	29	0.12
(1,1122)	1:A:14:TYR:HD2	1:A:11:LEU:HD12	29	0.12
(1,1122)	1:A:14:TYR:HD2	1:A:11:LEU:HD13	29	0.12
(1,1048)	1:A:119:SER:HB2	1:A:119:SER:H	18	0.12
(1,929)	1:A:69:VAL:HA	1:A:69:VAL:HG11	1	0.11
(1,929)	1:A:69:VAL:HA	1:A:69:VAL:HG12	1	0.11



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,929)	1:A:69:VAL:HA	1:A:69:VAL:HG13	1	0.11
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	1	0.11
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD21	23	0.11
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD22	23	0.11
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD23	23	0.11
(1,815)	1:A:122:LYS:HB2	1:A:122:LYS:HA	26	0.11
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	3	0.11
(1,315)	1:A:36:GLU:HG3	1:A:36:GLU:HA	7	0.11
(1,315)	1:A:36:GLU:HG3	1:A:36:GLU:HA	18	0.11
(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	10	0.11
(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	4	0.11
(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	17	0.11
(1,194)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:6:SER:HB2	7	0.11
(1,194)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:6:SER:HB2	7	0.11
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	2	0.11
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	2	0.11
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	2	0.11
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	2	0.11
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	15	0.11
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	15	0.11
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	15	0.11
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	15	0.11
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	8	0.11
(1,1463)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD3	9	0.11
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	2	0.11
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	2	0.11
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	2	0.11
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	10	0.11
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	10	0.11
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	10	0.11
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	25	0.11
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	25	0.11
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	25	0.11
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	12	0.11
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	12	0.11
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	12	0.11
(1,1199)	1:A:85:VAL:H	1:A:85:VAL:HG21	10	0.11
(1,1199)	1:A:85:VAL:H	1:A:85:VAL:HG22	10	0.11
(1,1199)	1:A:85:VAL:H	1:A:85:VAL:HG23	10	0.11
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	14	0.11
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	14	0.11
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	14	0.11



Continued from previous page...

(1,1069)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:5:VAL:H         19         0.11           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:5:VAL:H         19         0.11           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:5:VAL:H         27         0.11           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:5:VAL:H         27         0.11           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:5:VAL:H         27         0.11           (1,1069)         1:A:6:A:LEU:H         1:A:6:4:LEU:HD21         7         0.11           (1,1025)         1:A:6:A:LEU:H         1:A:6:A:LEU:HD23         7         0.11           (1,1025)         1:A:6:A:LEU:H         1:A:6:A:LEU:HD23         7         0.11           (1,988)         1:A:12:GLN:H         1:A:12:GLN:HG2         8         0.1           (1,987)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:HB2         7         0.1	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1069)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:5:VAL:H         19         0.11           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:5:VAL:H         27         0.11           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:5:VAL:H         27         0.11           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:5:VAL:H         27         0.11           (1,1048)         1:A:119:SER:HB2         1:A:119:SER:H         17         0.11           (1,1025)         1:A:64:LEU:H         1:A:64:LEU:HD21         7         0.11           (1,1025)         1:A:64:LEU:H         1:A:64:LEU:HD22         7         0.11           (1,1025)         1:A:64:LEU:H         1:A:64:LEU:HD23         7         0.11           (1,1025)         1:A:64:LEU:H         1:A:64:LEU:HD23         7         0.11           (1,988)         1:A:12:GLN:H         1:A:164:LEU:HD23         7         0.11           (1,867)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:H         27         0.1           (1,867)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:H         27         0.1           (1,815)         1:A:43:THR:HG21         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG21         1:A:38:PRO:HD3 <t< td=""><td>(1,1069)</td><td>1:A:5:VAL:HG21</td><td>1:A:5:VAL:H</td><td>19</td><td>0.11</td></t<>	(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	19	0.11
(1,1069)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:5:VAL:H         27         0.11           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:5:VAL:H         27         0.11           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:5:VAL:H         27         0.11           (1,1048)         1:A:119:SER:HB2         1:A:119:SER:H         17         0.11           (1,1025)         1:A:64:LEU:H         1:A:64:LEU:HD21         7         0.11           (1,1025)         1:A:64:LEU:H         1:A:64:LEU:HD22         7         0.11           (1,988)         1:A:12:GLN:H         1:A:64:LEU:HD23         7         0.11           (1,988)         1:A:12:GLN:H         1:A:103:ARG:H         10         0.1           (1,867)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:H         27         0.1           (1,867)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:H         27         0.1           (1,867)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:H         27         0.1           (1,867)         1:A:43:THR:HG21         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,867)         1:A:43:THR:HG21         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG23         1:A:38:PRO:HD3         1	(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	19	0.11
(1,1069)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:5:VAL:H         27         0.11           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:5:VAL:H         27         0.11           (1,1048)         1:A:119:SER:HB2         1:A:64:LEU:H         27         0.11           (1,1025)         1:A:64:LEU:H         1:A:64:LEU:HD21         7         0.11           (1,1025)         1:A:64:LEU:H         1:A:64:LEU:HD23         7         0.11           (1,1026)         1:A:43:CBU:H         1:A:12:CRN:HG2         8         0.1           (1,867)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:H         10         0.1           (1,867)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:H         10         0.1           (1,867)         1:A:43:THR:HG21         1:A:103:ARG:H         27         0.1           (1,815)         1:A:43:THR:HG21         1:A:38:PRO:HD3 <th< td=""><td>(1,1069)</td><td>1:A:5:VAL:HG23</td><td>1:A:5:VAL:H</td><td>19</td><td>0.11</td></th<>	(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	19	0.11
(1,1069)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:5:VAL:H         27         0.11           (1,1048)         1:A:119:SER:HB2         1:A:119:SER:H         17         0.11           (1,1025)         1:A:64:LEU:H         1:A:64:LEU:HD21         7         0.11           (1,1025)         1:A:64:LEU:H         1:A:64:LEU:HD22         7         0.11           (1,1025)         1:A:64:LEU:H         1:A:64:LEU:HD23         7         0.11           (1,1026)         1:A:64:LEU:H         1:A:64:LEU:HD23         7         0.11           (1,988)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:H         10         0.1           (1,867)         1:A:40:ARG:HB3         1:A:103:ARG:H         10         0.1           (1,867)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:H         10         0.1           (1,867)         1:A:43:THR:HG21         1:A:12:2LYS:HA         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG21         1:A:38:PRO:HD3	(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	27	0.11
(1,1048)         1:A:119:SER:HB2         1:A:119:SER:H         17         0.11           (1,1025)         1:A:64:LEU:H         1:A:64:LEU:HD21         7         0.11           (1,1025)         1:A:64:LEU:H         1:A:64:LEU:HD22         7         0.11           (1,1025)         1:A:64:LEU:H         1:A:64:LEU:HD23         7         0.11           (1,1025)         1:A:64:LEU:H         1:A:64:LEU:HD23         7         0.11           (1,988)         1:A:12:GLN:H         1:A:12:GEN:HG2         8         0.1           (1,867)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:H         10         0.1           (1,867)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:H         10         0.1           (1,867)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:H         27         0.1           (1,867)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:H         27         0.1           (1,867)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:H         27         0.1           (1,867)         1:A:43:THR:HG21         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG22         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG23         1:A:49:LYS:HA2         <	(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	27	0.11
(1,1025)         1:A:64:LEU:H         1:A:64:LEU:HD21         7         0.11           (1,1025)         1:A:64:LEU:H         1:A:64:LEU:HD22         7         0.11           (1,1025)         1:A:64:LEU:H         1:A:64:LEU:HD23         7         0.11           (1,988)         1:A:12:GLN:H         1:A:12:GLN:HG2         8         0.1           (1,867)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:H         10         0.1           (1,867)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:H         27         0.1           (1,815)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:H         27         0.1           (1,815)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:HB3         1:A:10:103:ARG:HB3         1:A:10:10:ARG:HB3         1:A:10:10:ARG:HB3         1:A:10:10:ARG:HB3         1:A:10:ARG:HB3         1:A:10:ARG:HB3         1:A:10:ARG:HB3         1:A:10:ARG:HB3         1:A:10:ARG:HB3         1:A:10:ARG:H	(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	27	0.11
(1,1025)         1:A:64:LEU:H         1:A:64:LEU:HD22         7         0.11           (1,1025)         1:A:64:LEU:H         1:A:64:LEU:HD23         7         0.11           (1,988)         1:A:12:GLN:H         1:A:103:ARG:HG2         8         0.1           (1,867)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:H         10         0.1           (1,867)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:H         27         0.1           (1,867)         1:A:43:THR:HG21         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG22         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG23         1:A:49:PILYS:HA         23         0.1           (1,407)         1:A:76:ARG:HA3         1:A:76:ARG:HG3         15         0.1           (1,407)         1:A:3:6:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         <	(1,1048)	1:A:119:SER:HB2	1:A:119:SER:H	17	0.11
(1,1025)         1:A:64:LEU:H         1:A:64:LEU:HD23         7         0.11           (1,988)         1:A:12:GLN:H         1:A:12:GLN:HG2         8         0.1           (1,867)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:H         10         0.1           (1,867)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:H         27         0.1           (1,865)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:H         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG21         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG22         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG23         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG22         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG23         1:A:47:EARG:HD3         1         0.1           (1,407)         1:A:50:AG:HB3         1:A:16:THR:HB3         1	(1,1025)	1:A:64:LEU:H	1:A:64:LEU:HD21	7	0.11
(1,988)         1:A:12:GLN:H         1:A:12:GLN:HG2         8         0.1           (1,867)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:H         10         0.1           (1,867)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:H         27         0.1           (1,867)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:H         27         0.1           (1,865)         1:A:122:LYS:HB2         1:A:122:LYS:HA         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG21         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG22         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG23         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG23         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG23         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG22         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,561)         1:A:49:1:LYS:HB2         1:A:49:1:LYS:HA         23         0.1           (1,407)         1:A:56:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         15         0.1           (1,324)         1:A:16:THR:HB         1:A:16:THR:HB	(1,1025)	1:A:64:LEU:H	1:A:64:LEU:HD22	7	0.11
(1,867)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:H         10         0.1           (1,867)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:H         27         0.1           (1,815)         1:A:122:LYS:HB2         1:A:122:LYS:HA         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG21         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG22         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG23         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,567)         1:A:43:THR:HG23         1:A:48:PRO:HD3         1         0.1           (1,561)         1:A:49:1:LYS:HB2         1:A:49:1:LYS:HA2         23         0.1           (1,407)         1:A:58:G:AG:HA3         1:A:47:6:ARG:HG3         15         0.1           (1,324)         1:A:16:THR:HB3         1:A:16:THR:HB3	(1,1025)	1:A:64:LEU:H	1:A:64:LEU:HD23	7	0.11
(1,867)         1:A:103:ARG:HB3         1:A:103:ARG:H         27         0.1           (1,815)         1:A:122:LYS:HB2         1:A:122:LYS:HA         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG21         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG22         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG23         1:A:39:LYS:HA         23         0.1           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         15         0.1           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         17         0.1           (1,324)         1:A:16:THR:HB         1:A:16:THR:H         4         0.1           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         22         0.1           (1,231)         1:A:109:GLN:H         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,194)         1:A:109:GLN:H         1:A:6:SER:HB2         4	(1,988)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HG2	8	0.1
(1,815)         1:A:122:LYS:HB2         1:A:122:LYS:HA         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG21         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG22         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG23         1:A:39:LYS:HA         23         0.1           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         15         0.1           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         17         0.1           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         17         0.1           (1,324)         1:A:16:THR:HB         1:A:16:THR:H         4         0.1           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         22         0.1           (1,231)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,194)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:6:SER:HB2         4	(1,867)	1:A:103:ARG:HB3	1:A:103:ARG:H	10	0.1
(1,565)         1:A:43:THR:HG21         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG22         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG23         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,512)         1:A:91:LYS:HB2         1:A:91:LYS:HA         23         0.1           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         15         0.1           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         17         0.1           (1,324)         1:A:16:THR:HB         1:A:16:THR:H         4         0.1           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         22         0.1           (1,231)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,194)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:6:SER:HB2         4	(1,867)	1:A:103:ARG:HB3	1:A:103:ARG:H	27	0.1
(1,565)         1:A:43:THR:HG22         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG23         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,565)         1:A:43:THR:HG23         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,565)         1:A:49:LYS:HB2         1:A:39:LYS:HA         23         0.1           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         15         0.1           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         17         0.1           (1,324)         1:A:16:THR:HB         1:A:16:THR:H         4         0.1           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         22         0.1           (1,231)         1:A:109:GLN:H         1:A:60:SER:HB2         4         0.1           (1,194)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,194)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         4         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         4	(1,815)	1:A:122:LYS:HB2	1:A:122:LYS:HA	1	0.1
(1,565)         1:A:43:THR:HG23         1:A:38:PRO:HD3         1         0.1           (1,512)         1:A:91:LYS:HB2         1:A:91:LYS:HA         23         0.1           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         15         0.1           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         17         0.1           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         17         0.1           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         17         0.1           (1,324)         1:A:16:THR:HB         1:A:16:THR:H         4         0.1           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         22         0.1           (1,231)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,194)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,194)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         4         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         4	(1,565)	1:A:43:THR:HG21	1:A:38:PRO:HD3	1	0.1
(1,512)         1:A:91:LYS:HB2         1:A:91:LYS:HA         23         0.1           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         15         0.1           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         17         0.1           (1,324)         1:A:16:THR:HB         1:A:16:THR:H         4         0.1           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         22         0.1           (1,231)         1:A:109:GLN:H         1:A:109:GLN:HG3         2         0.1           (1,194)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,194)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,197)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         4         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         4         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         6         <	(1,565)	1:A:43:THR:HG22	1:A:38:PRO:HD3	1	0.1
(1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         15         0.1           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         17         0.1           (1,324)         1:A:16:THR:HB         1:A:16:THR:H         4         0.1           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         22         0.1           (1,231)         1:A:109:GLN:H         1:A:109:GLN:HG3         2         0.1           (1,194)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,194)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,194)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,194)         1:A:51:PHB3         1:A:51:PHE:HB2         4         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         4         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         4         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         6         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         6         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         6	(1,565)	1:A:43:THR:HG23	1:A:38:PRO:HD3	1	0.1
(1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         17         0.1           (1,324)         1:A:16:THR:HB         1:A:16:THR:H         4         0.1           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         22         0.1           (1,231)         1:A:109:GLN:H         1:A:109:GLN:HG3         2         0.1           (1,194)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,194)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,194)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,194)         1:A:43:THR:H         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,157)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         4         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         4         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         4         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         6         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         6         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         6	(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	23	0.1
(1,324)         1:A:16:THR:HB         1:A:16:THR:H         4         0.1           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         22         0.1           (1,231)         1:A:109:GLN:H         1:A:109:GLN:HG3         2         0.1           (1,194)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,194)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,194)         1:A:43:THR:H         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,194)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         16         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         4         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         4         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         4         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         6         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         6         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         0.1	(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	15	0.1
(1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         22         0.1           (1,231)         1:A:109:GLN:H         1:A:109:GLN:HG3         2         0.1           (1,194)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,194)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,194)         1:A:43:THR:H         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         16         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         4         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         4         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         6         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         6         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         6         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         0.1           (1,15	(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	17	0.1
(1,231)         1:A:109:GLN:H         1:A:109:GLN:HG3         2         0.1           (1,194)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,194)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         16         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         4         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         4         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         4         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         6         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         6         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         6         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         10         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         10         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         10         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3 <th< td=""><td>(1,324)</td><td>1:A:16:THR:HB</td><td>1:A:16:THR:H</td><td>4</td><td>0.1</td></th<>	(1,324)	1:A:16:THR:HB	1:A:16:THR:H	4	0.1
(1,194)         1:A:10:ASP:HB2         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,194)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         16         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         4         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         4         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB2         4         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         4         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         6         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         6         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         6         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         10         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         10         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         10         0.1	(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	22	0.1
(1,194)         1:A:10:ASP:HB3         1:A:6:SER:HB2         4         0.1           (1,1618)         1:A:43:THR:H         1:A:40:ASP:OD1         16         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         4         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         4         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB2         4         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         4         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         6         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB2         6         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         6         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         10         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         10         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         10         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         10         0.1	(1,231)	1:A:109:GLN:H	1:A:109:GLN:HG3	2	0.1
(1,1618)       1:A:43:THR:H       1:A:40:ASP:OD1       16       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB2       4       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       4       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       4       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       4       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       6       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       6       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       6       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       10       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       10       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       10       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       10       0.1	(1,194)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:6:SER:HB2	4	0.1
(1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB2       4       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       4       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       4       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       4       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB2       6       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       6       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       6       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       10       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       10       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       10       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       10       0.1	(1,194)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:6:SER:HB2	4	0.1
(1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       4       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       4       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       4       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB2       6       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       6       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       6       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       6       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB2       10       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       10       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       10       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       10       0.1	(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	16	0.1
(1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       4       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       4       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB2       6       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       6       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       6       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       6       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB2       10       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       10       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       10       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       10       0.1	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	4	0.1
(1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       4       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB2       6       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       6       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       6       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       6       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB2       10       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       10       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       10       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       10       0.1	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	4	0.1
(1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB2       6       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       6       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       6       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       6       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB2       10       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       10       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       10       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       10       0.1	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	4	0.1
(1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       6       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       6       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       6       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB2       10       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       10       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       10       0.1	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	4	0.1
(1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       6       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       6       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB2       10       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       10       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       10       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       10       0.1	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	6	0.1
(1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       6       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB2       10       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       10       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       10       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       10       0.1	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	6	0.1
(1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB2       10       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       10       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       10       0.1	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	6	0.1
(1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       10       0.1         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       10       0.1	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	6	0.1
(1,1571) 1:A:57:PHE:HB3 1:A:51:PHE:HB2 10 0.1	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	10	0.1
	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	10	0.1
(1.1891) 1.4 89 DID IID0 1.4 84 DID IID0 1.0	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	10	0.1
(1,1571)   1:A:57:PHE:HB3   1:A:51:PHE:HB3   10   0.1	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	10	0.1
(1,1571) 1:A:57:PHE:HB2 1:A:51:PHE:HB2 13 0.1	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	13	0.1
(1,1571) 1:A:57:PHE:HB2 1:A:51:PHE:HB3 13 0.1	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	13	0.1
(1,1571) 1:A:57:PHE:HB3 1:A:51:PHE:HB2 13 0.1	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	13	0.1
(1,1571) 1:A:57:PHE:HB3 1:A:51:PHE:HB3 13 0.1	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	13	0.1



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

(1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         17         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         17         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         17         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         17         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         22         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB2         22         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB2         22         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         22         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         30         0.1           (1,1571)         1:A:36:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3<	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         17         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         17         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         22         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         22         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         22         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         22         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         30         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         30         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         30         0.1           (1,1571)         1:A:54:MET:HB3         1:A:51:PHE:HB3<	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	17	0.1
(1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB2         22         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         22         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         22         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB2         22         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB2         30         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         30         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         30         0.1           (1,1571)         1:A:54:MET.HB3         1:A:51:PHE:HB3         30         0.1           (1,1463)         1:A:54:MET.HB1         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET.HE1         1:A:11:LEU:HD1	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	17	0.1
(1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         22         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         22         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB2         22         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         22         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         30         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         30         0.1           (1,1571)         1:A:54:MET.HB3         1:A:31:LEU:HB3         30         0.1           (1,1463)         1:A:54:MET.HE1         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET.HE1         1:A:11:LEU:HD1	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	17	0.1
(1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         22         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB2         22         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         22         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         30         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         30         0.1           (1,1571)         1:A:54:MET:HB3         1:A:51:PHE:HB3         30         0.1           (1,1463)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	17	0.1
(1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         22         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         22         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         30         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         30         0.1           (1,1463)         1:A:54:MET:HB3         1:A:51:PHE:HB3         30         0.1           (1,1463)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	22	0.1
(1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         22         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         30         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         30         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB2         30         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         30         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB2         30         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         30         0.1           (1,1571)         1:A:54:MET         1:A:51:PHE:HB3         30         0.1           (1,1463)         1:A:54:MET:HE1         1:A:31:LY:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	22	0.1
(1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         30         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         30         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB2         30         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         30         0.1           (1,1463)         1:A:54:MET:HE1         1:A:31:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	22	0.1
(1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         30         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB2         30         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         30         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         30         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         30         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:0         0.1           (1,1463)         1:A:35:TRP:H         1:A:31:LEU:HD1         21         0.1           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	22	0.1
(1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         30         0.1           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         30         0.1           (1,1515)         1:A:35:TRP:H         1:A:35:TRP:HD1         21         0.1           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:L	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	30	0.1
(1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         30         0.1           (1,1515)         1:A:35:TRP:H         1:A:35:TRP:HD1         21         0.1           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	30	0.1
(1,1515)         1:A:35:TRP:H         1:A:35:TRP:HD1         21         0.1           (1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD21         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD22         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:L	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	30	0.1
(1,1463)         1:A:38:PRO:HD2         1:A:31:LYS:HD3         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD13         23         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD21         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	30	0.1
(1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:21:LEU:HD13         23         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD21         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:	(1,1515)	1:A:35:TRP:H	1:A:35:TRP:HD1	21	0.1
(1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:21:LEU:HD13         23         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD21         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:	(1,1463)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD3	23	0.1
(1,1367)         1:A:54:MET:HE1         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1314)         1:A:54:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD21         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD22         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         10         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         29         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:2		1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD11	23	0.1
(1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD21         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD22         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         10         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         29         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:2	` ′	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD12	23	0.1
(1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD21         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD22         10         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         10         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         29         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:	(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD13	23	0.1
(1,1367)         1:A:54:MET:HE2         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD21         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD22         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD21         10         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD22         10         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         10         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD21         29         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD22         29         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         29         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:		1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD11	23	0.1
(1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD11         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD21         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD22         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD21         10         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         10         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD21         29         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD22         29         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         29         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         29         0.1           (1,136)         1:A:74:HIS:HD2         1:A:74:HIS:HA         11         0.1           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:5:VA	(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD12	23	0.1
(1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD12         23         0.1           (1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD21         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD22         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD21         10         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD22         10         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         10         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD21         29         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD22         29         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         29         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:74:HIS:HA         11         0.1           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:5:VAL:H         28         0.1           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:5:VAL:H	(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD13	23	0.1
(1,1367)         1:A:54:MET:HE3         1:A:11:LEU:HD13         23         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD21         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD22         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD21         10         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         10         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         10         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD21         29         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD22         29         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         29         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:74:HIS:HA         11         0.1           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:74:HIS:HA         11         0.1           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:5:VAL:H         28         0.1           (1,1048)         1:A:119:SER:HB2         1:A:119:SER:	(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD11	23	0.1
(1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD21         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD22         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD21         10         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD22         10         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         10         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD21         29         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD22         29         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         29         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:74:HIS:HA         11         0.1           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:74:HIS:HA         11         0.1           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:5:VAL:H         28         0.1           (1,1048)         1:A:119:SER:HB2         1:A:119:SER:H         1         0.1	(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD12	23	0.1
(1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD22         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         1         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD21         10         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD22         10         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         10         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD21         29         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD22         29         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:22:LEU:HD23         29         0.1           (1,1314)         1:A:45:CYS:HB2         1:A:74:HIS:HA         11         0.1           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG21         1:A:74:HIS:HA         11         0.1           (1,1069)         1:A:5:VAL:HG22         1:A:5:VAL:H         28         0.1           (1,1048)         1:A:5:VAL:HG23         1:A:5:VAL:H         28         0.1           (1,1048)         1:A:119:SER:HB2         1:A:119:SER:H         1         0.1	(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD13	23	0.1
(1,1314)       1:A:45:CYS:HB2       1:A:22:LEU:HD23       1       0.1         (1,1314)       1:A:45:CYS:HB2       1:A:22:LEU:HD21       10       0.1         (1,1314)       1:A:45:CYS:HB2       1:A:22:LEU:HD22       10       0.1         (1,1314)       1:A:45:CYS:HB2       1:A:22:LEU:HD23       10       0.1         (1,1314)       1:A:45:CYS:HB2       1:A:22:LEU:HD21       29       0.1         (1,1314)       1:A:45:CYS:HB2       1:A:22:LEU:HD22       29       0.1         (1,1314)       1:A:45:CYS:HB2       1:A:22:LEU:HD23       29       0.1         (1,1314)       1:A:74:HIS:HD2       1:A:74:HIS:HA       11       0.1         (1,1069)       1:A:74:HIS:HD2       1:A:74:HIS:HA       11       0.1         (1,1069)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:5:VAL:H       28       0.1         (1,1069)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:5:VAL:H       28       0.1         (1,1048)       1:A:119:SER:HB2       1:A:119:SER:H       1       0.1	(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	1	0.1
(1,1314)       1:A:45:CYS:HB2       1:A:22:LEU:HD21       10       0.1         (1,1314)       1:A:45:CYS:HB2       1:A:22:LEU:HD22       10       0.1         (1,1314)       1:A:45:CYS:HB2       1:A:22:LEU:HD23       10       0.1         (1,1314)       1:A:45:CYS:HB2       1:A:22:LEU:HD21       29       0.1         (1,1314)       1:A:45:CYS:HB2       1:A:22:LEU:HD22       29       0.1         (1,1314)       1:A:45:CYS:HB2       1:A:22:LEU:HD23       29       0.1         (1,1314)       1:A:45:CYS:HB2       1:A:22:LEU:HD23       29       0.1         (1,1069)       1:A:74:HIS:HD2       1:A:74:HIS:HA       11       0.1         (1,1069)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:5:VAL:H       28       0.1         (1,1069)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:5:VAL:H       28       0.1         (1,1048)       1:A:119:SER:HB2       1:A:119:SER:H       1       0.1	(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	1	0.1
(1,1314)       1:A:45:CYS:HB2       1:A:22:LEU:HD22       10       0.1         (1,1314)       1:A:45:CYS:HB2       1:A:22:LEU:HD23       10       0.1         (1,1314)       1:A:45:CYS:HB2       1:A:22:LEU:HD21       29       0.1         (1,1314)       1:A:45:CYS:HB2       1:A:22:LEU:HD22       29       0.1         (1,1314)       1:A:45:CYS:HB2       1:A:22:LEU:HD23       29       0.1         (1,1186)       1:A:74:HIS:HD2       1:A:74:HIS:HA       11       0.1         (1,1069)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:5:VAL:H       28       0.1         (1,1069)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:5:VAL:H       28       0.1         (1,1069)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:5:VAL:H       28       0.1         (1,1048)       1:A:119:SER:HB2       1:A:119:SER:H       1       0.1	(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	1	0.1
(1,1314)       1:A:45:CYS:HB2       1:A:22:LEU:HD23       10       0.1         (1,1314)       1:A:45:CYS:HB2       1:A:22:LEU:HD21       29       0.1         (1,1314)       1:A:45:CYS:HB2       1:A:22:LEU:HD22       29       0.1         (1,1314)       1:A:45:CYS:HB2       1:A:22:LEU:HD23       29       0.1         (1,1314)       1:A:74:HIS:HD2       1:A:74:HIS:HA       11       0.1         (1,1069)       1:A:74:HIS:HD2       1:A:74:HIS:HA       11       0.1         (1,1069)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:5:VAL:H       28       0.1         (1,1069)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:5:VAL:H       28       0.1         (1,1048)       1:A:119:SER:HB2       1:A:119:SER:H       1       0.1	(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	10	0.1
(1,1314)       1:A:45:CYS:HB2       1:A:22:LEU:HD21       29       0.1         (1,1314)       1:A:45:CYS:HB2       1:A:22:LEU:HD22       29       0.1         (1,1314)       1:A:45:CYS:HB2       1:A:22:LEU:HD23       29       0.1         (1,1186)       1:A:74:HIS:HD2       1:A:74:HIS:HA       11       0.1         (1,1069)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:5:VAL:H       28       0.1         (1,1069)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:5:VAL:H       28       0.1         (1,1069)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:5:VAL:H       28       0.1         (1,1048)       1:A:119:SER:HB2       1:A:119:SER:H       1       0.1	(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	10	0.1
(1,1314)       1:A:45:CYS:HB2       1:A:22:LEU:HD22       29       0.1         (1,1314)       1:A:45:CYS:HB2       1:A:22:LEU:HD23       29       0.1         (1,1186)       1:A:74:HIS:HD2       1:A:74:HIS:HA       11       0.1         (1,1069)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:5:VAL:H       28       0.1         (1,1069)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:5:VAL:H       28       0.1         (1,1069)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:5:VAL:H       28       0.1         (1,1048)       1:A:119:SER:HB2       1:A:119:SER:H       1       0.1	(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	10	0.1
(1,1314)       1:A:45:CYS:HB2       1:A:22:LEU:HD23       29       0.1         (1,1186)       1:A:74:HIS:HD2       1:A:74:HIS:HA       11       0.1         (1,1069)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:5:VAL:H       28       0.1         (1,1069)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:5:VAL:H       28       0.1         (1,1069)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:5:VAL:H       28       0.1         (1,1048)       1:A:119:SER:HB2       1:A:119:SER:H       1       0.1	(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	29	0.1
(1,1186)       1:A:74:HIS:HD2       1:A:74:HIS:HA       11       0.1         (1,1069)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:5:VAL:H       28       0.1         (1,1069)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:5:VAL:H       28       0.1         (1,1069)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:5:VAL:H       28       0.1         (1,1048)       1:A:119:SER:HB2       1:A:119:SER:H       1       0.1	(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	29	0.1
(1,1069)       1:A:5:VAL:HG21       1:A:5:VAL:H       28       0.1         (1,1069)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:5:VAL:H       28       0.1         (1,1069)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:5:VAL:H       28       0.1         (1,1048)       1:A:119:SER:HB2       1:A:119:SER:H       1       0.1	(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	29	0.1
(1,1069)       1:A:5:VAL:HG22       1:A:5:VAL:H       28       0.1         (1,1069)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:5:VAL:H       28       0.1         (1,1048)       1:A:119:SER:HB2       1:A:119:SER:H       1       0.1	(1,1186)	1:A:74:HIS:HD2	1:A:74:HIS:HA	11	0.1
(1,1069)       1:A:5:VAL:HG23       1:A:5:VAL:H       28       0.1         (1,1048)       1:A:119:SER:HB2       1:A:119:SER:H       1       0.1	(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	28	0.1
(1,1048) 1:A:119:SER:HB2 1:A:119:SER:H 1 0.1	(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	28	0.1
	(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	28	0.1
(1,1048) 1:A:119:SER:HB2 1:A:119:SER:H 15 0.1	(1,1048)	1:A:119:SER:HB2	1:A:119:SER:H	1	0.1
	(1,1048)	1:A:119:SER:HB2	1:A:119:SER:H	15	0.1
(1,1048) 1:A:119:SER:HB2 1:A:119:SER:H 23 0.1		1:A:119:SER:HB2	1:A:119:SER:H	23	0.1
(1,1048) 1:A:119:SER:HB2 1:A:119:SER:H 25 0.1	(1,1048)	1:A:119:SER:HB2	1:A:119:SER:H	25	0.1
(1,823) 1:A:110:LYS:HG2 1:A:110:LYS:HE2 6 0.09		1:A:110:LYS:HG2	1:A:110:LYS:HE2	6	0.09
(1,823) 1:A:110:LYS:HG2 1:A:110:LYS:HE3 6 0.09	(1,823)	1:A:110:LYS:HG2	1:A:110:LYS:HE3	6	0.09



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,815)	1:A:122:LYS:HB2	1:A:122:LYS:HA	19	0.09
(1,815)	1:A:122:LYS:HB2	1:A:122:LYS:HA	25	0.09
(1,70)	1:A:18:CYS:HA	1:A:21:SER:HB2	9	0.09
(1,70)	1:A:18:CYS:HA	1:A:21:SER:HB3	9	0.09
(1,564)	1:A:6:SER:H	1:A:6:SER:HB3	13	0.09
(1,500)	1:A:43:THR:H	1:A:43:THR:HG1	21	0.09
(1,379)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HB2	6	0.09
(1,379)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HB2	7	0.09
(1,379)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HB2	9	0.09
(1,379)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HB2	10	0.09
(1,379)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HB2	14	0.09
(1,379)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HB2	17	0.09
(1,379)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HB2	28	0.09
(1,379)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HB2	29	0.09
(1,289)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:107:CYS:H	29	0.09
(1,169)	1:A:3:PHE:H	1:A:2:GLU:HB2	10	0.09
(1,169)	1:A:3:PHE:H	1:A:2:GLU:HB2	25	0.09
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	8	0.09
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	8	0.09
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	8	0.09
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	8	0.09
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	27	0.09
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	27	0.09
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	27	0.09
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	27	0.09
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH11	20	0.09
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH12	20	0.09
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH21	20	0.09
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH22	20	0.09
(1,1547)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:38:PRO:HD2	10	0.09
(1,1547)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB2	10	0.09
(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH11	15	0.09
(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH12	15	0.09
(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH21	15	0.09
(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH22	15	0.09
(1,1482)	1:A:48:LYS:H	1:A:48:LYS:HG2	19	0.09
(1,1482)	1:A:48:LYS:H	1:A:48:LYS:HG3	19	0.09
(1,1463)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD3	20	0.09
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH11	10	0.09
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH12	10	0.09
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH21	10	0.09
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH22	10	0.09



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	4	0.09
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	4	0.09
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	4	0.09
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	12	0.09
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	12	0.09
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	12	0.09
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	26	0.09
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	26	0.09
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	26	0.09
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	25	0.09
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	25	0.09
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	25	0.09
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	2	0.09
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	2	0.09
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	2	0.09
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	9	0.09
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	9	0.09
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	9	0.09
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	16	0.09
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	16	0.09
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	16	0.09
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	26	0.09
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	26	0.09
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	26	0.09
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	20	0.09
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	29	0.09
(1,1048)	1:A:119:SER:HB2	1:A:119:SER:H	3	0.09
(1,1048)	1:A:119:SER:HB2	1:A:119:SER:H	10	0.09
(1,1025)	1:A:64:LEU:H	1:A:64:LEU:HD21	13	0.09
(1,1025)	1:A:64:LEU:H	1:A:64:LEU:HD22	13	0.09
(1,1025)	1:A:64:LEU:H	1:A:64:LEU:HD23	13	0.09
(1,988)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HG2	26	0.08
(1,928)	1:A:16:THR:HA	1:A:19:VAL:HB	24	0.08
(1,823)	1:A:110:LYS:HG2	1:A:110:LYS:HE2	13	0.08
(1,823)	1:A:110:LYS:HG2	1:A:110:LYS:HE3	13	0.08
(1,815)	1:A:122:LYS:HB2	1:A:122:LYS:HA	6	0.08
(1,815)	1:A:122:LYS:HB2	1:A:122:LYS:HA	29	0.08
(1,727)	1:A:51:PHE:HA	1:A:51:PHE:HD1	28	0.08
(1,727)	1:A:51:PHE:HA	1:A:51:PHE:HD2	28	0.08
(1,564)	1:A:6:SER:H	1:A:6:SER:HB3	15	0.08
(1,564)	1:A:6:SER:H	1:A:6:SER:HB3	19	0.08
(1,521)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:103:ARG:HA	2	0.08



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,411)	1:A:65:VAL:H	1:A:65:VAL:HB	6	0.08
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	21	0.08
(1,379)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HB2	1	0.08
(1,379)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HB2	2	0.08
(1,379)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HB2	3	0.08
(1,379)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HB2	5	0.08
(1,379)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HB2	8	0.08
(1,379)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HB2	12	0.08
(1,379)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HB2	13	0.08
(1,379)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HB2	16	0.08
(1,379)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HB2	18	0.08
(1,379)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HB2	19	0.08
(1,379)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HB2	20	0.08
(1,379)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HB2	21	0.08
(1,379)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HB2	25	0.08
(1,379)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HB2	26	0.08
(1,379)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HB2	27	0.08
(1,379)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HB2	30	0.08
(1,287)	1:A:84:GLU:H	1:A:84:GLU:HG3	19	0.08
(1,287)	1:A:84:GLU:H	1:A:84:GLU:HG3	25	0.08
(1,169)	1:A:3:PHE:H	1:A:2:GLU:HB2	14	0.08
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	2	0.08
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	14	0.08
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	14	0.08
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	14	0.08
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	14	0.08
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	26	0.08
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	26	0.08
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	26	0.08
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	26	0.08
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	29	0.08
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	29	0.08
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	29	0.08
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	29	0.08
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH11	12	0.08
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH12	12	0.08
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH21	12	0.08
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH22	12	0.08
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:20:SER:HB2	8	0.08
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:20:SER:HB3	8	0.08
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:20:SER:HB2	8	0.08
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:20:SER:HB3	8	0.08



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:20:SER:HB2	8	0.08
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:20:SER:HB3	8	0.08
(1,1463)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD3	4	0.08
(1,1463)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD3	30	0.08
(1,1391)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:78:ALA:HA	16	0.08
(1,1391)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:78:ALA:HA	16	0.08
(1,1391)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:78:ALA:HA	16	0.08
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	18	0.08
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	20	0.08
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	20	0.08
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	20	0.08
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	9	0.08
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	9	0.08
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	9	0.08
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	25	0.08
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	25	0.08
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	25	0.08
(1,815)	1:A:122:LYS:HB2	1:A:122:LYS:HA	14	0.07
(1,565)	1:A:43:THR:HG21	1:A:38:PRO:HD3	5	0.07
(1,565)	1:A:43:THR:HG22	1:A:38:PRO:HD3	5	0.07
(1,565)	1:A:43:THR:HG23	1:A:38:PRO:HD3	5	0.07
(1,565)	1:A:43:THR:HG21	1:A:38:PRO:HD3	8	0.07
(1,565)	1:A:43:THR:HG22	1:A:38:PRO:HD3	8	0.07
(1,565)	1:A:43:THR:HG23	1:A:38:PRO:HD3	8	0.07
(1,521)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:103:ARG:HA	4	0.07
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	10	0.07
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	10	0.07
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	10	0.07
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	14	0.07
(1,379)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HB2	11	0.07
(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	6	0.07
(1,287)	1:A:84:GLU:H	1:A:84:GLU:HG3	13	0.07
(1,287)	1:A:84:GLU:H	1:A:84:GLU:HG3	20	0.07
(1,224)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:H	2	0.07
(1,224)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:H	2	0.07
(1,224)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:H	2	0.07
(1,224)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:H	4	0.07
(1,224)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:H	4	0.07
(1,224)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:H	4	0.07
(1,194)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:6:SER:HB2	13	0.07
(1,194)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:6:SER:HB2	13	0.07
(1,169)	1:A:3:PHE:H			



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,169)	1:A:3:PHE:H	1:A:2:GLU:HB2	29	0.07
(1,166)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HG2	23	0.07
(1,166)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HG3	23	0.07
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	15	0.07
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	7	0.07
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	7	0.07
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	7	0.07
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	7	0.07
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	21	0.07
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	21	0.07
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	21	0.07
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	21	0.07
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	25	0.07
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	25	0.07
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	25	0.07
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	25	0.07
(1,1569)	1:A:8:THR:HG21	1:A:12:GLN:HG2	9	0.07
(1,1569)	1:A:8:THR:HG22	1:A:12:GLN:HG2	9	0.07
(1,1569)	1:A:8:THR:HG23	1:A:12:GLN:HG2	9	0.07
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH11	19	0.07
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH12	19	0.07
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH21	19	0.07
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH22	19	0.07
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:20:SER:HB2	7	0.07
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:20:SER:HB3	7	0.07
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:20:SER:HB2	7	0.07
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:20:SER:HB3	7	0.07
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:20:SER:HB2	7	0.07
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:20:SER:HB3	7	0.07
(1,1447)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HA	8	0.07
(1,1447)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HA	8	0.07
(1,1447)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HA	8	0.07
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	20	0.07
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	20	0.07
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	20	0.07
(1,1186)	1:A:74:HIS:HD2	1:A:74:HIS:HA	2	0.07
(1,1048)	1:A:119:SER:HB2	1:A:119:SER:H	5	0.07
(1,1025)	1:A:64:LEU:H	1:A:64:LEU:HD21	29	0.07
(1,1025)	1:A:64:LEU:H	1:A:64:LEU:HD22	29	0.07
(1,1025)	1:A:64:LEU:H	1:A:64:LEU:HD23	29	0.07
(1,1001)	1:A:116:ILE:H	1:A:115:LEU:HB2	22	0.07
(1,988)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HG2	4	0.06



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

(1,964) 1:A:83:THR:H	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,94) 1:A:63:PRO:HB3 1:A:68:LEU:HD12 30 0.06 (1,94) 1:A:63:PRO:HB3 1:A:68:LEU:HD13 30 0.06 (1,82) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:64:LEU:HD21 6 0.06 (1,82) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:64:LEU:HD22 6 0.06 (1,82) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:64:LEU:HD22 6 0.06 (1,89) 1:A:77:ASP:HB3 1:A:80:GLU:HB2 8 0.06 (1,699) 1:A:77:ASP:HB3 1:A:80:GLU:HB3 8 0.06 (1,699) 1:A:77:ASP:HB3 1:A:80:GLU:HB3 8 0.06 (1,565) 1:A:43:THR:HG21 1:A:38:PRO:HD3 18 0.06 (1,565) 1:A:43:THR:HG22 1:A:38:PRO:HD3 18 0.06 (1,566) 1:A:43:THR:HG23 1:A:38:PRO:HD3 18 0.06 (1,566) 1:A:46:SER:H 1:A:6:SER:HB3 10 0.06 (1,564) 1:A:6:SER:H 1:A:6:SER:HB3 10 0.06 (1,475) 1:A:110:LYS:HA 1:A:110:LYS:HG3 4 0.06 (1,441) 1:A:6:SER:H 1:A:6:SER:HB3 21 0.06 (1,407) 1:A:76:ARG:HA 1:A:76:ARG:HG3 7 0.06 (1,407) 1:A:76:ARG:HA 1:A:76:ARG:HG3 7 0.06 (1,295) 1:A:80:GLU:HA 1:A:80:GLU:HG3 7 0.06 (1,295) 1:A:80:GLU:HA 1:A:80:GLU:HG3 7 0.06 (1,295) 1:A:80:GLU:HA 1:A:80:GLU:HG3 13 0.06 (1,289) 1:A:106:LYS:HB2 1:A:107:CYS:H 12 0.06 (1,169) 1:A:3:PHE:H 1:A:2:GLU:HB2 3 0.06 (1,1571) 1:A:57:PHE:HB2 1:A:51:PHE:HB3 3 0.06 (1,1571) 1:A:57:PHE:HB2 1:A:51:PHE:HB3 3 0.06 (1,1571) 1:A:57:PHE:HB2 1:A:51:PHE:HB3 16 0.06 (1,1571) 1:A:57:PHE:HB2 1:A:51:PHE:HB3 16 0.06 (1,1571) 1:A:57:PHE:HB3 1:A:51:PHE:HB3 16 0.06 (1,1571) 1:A:57:PHE:HB2 1:A:51:PHE:HB3 16 0.06 (1,1571) 1:A:57:PHE:HB2 1:A:51:PHE:HB3 16 0.06 (1,1571) 1:A:57:PHE:HB3 1:A:51:PHE:HB3 19 0.06	(1,964)	1:A:83:THR:H	1:A:83:THR:HB	25	0.06
(1,94)	(1,94)	1:A:63:PRO:HB3	1:A:68:LEU:HD11	30	0.06
(1,82) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:64:LEU:HD21 6 0.06 (1,82) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:64:LEU:HD22 6 0.06 (1,82) 1:A:61:GLU:HB3 1:A:64:LEU:HD23 6 0.06 (1,89) 1:A:77:ASP:HB3 1:A:80:GLU:HB2 8 0.06 (1,699) 1:A:77:ASP:HB3 1:A:80:GLU:HB3 8 0.06 (1,569) 1:A:43:THR:HG21 1:A:38:PRO:HD3 18 0.06 (1,565) 1:A:43:THR:HG21 1:A:38:PRO:HD3 18 0.06 (1,565) 1:A:43:THR:HG22 1:A:38:PRO:HD3 18 0.06 (1,565) 1:A:43:THR:HG23 1:A:38:PRO:HD3 18 0.06 (1,564) 1:A:6:SER:H 1:A:6:SER:HB3 10 0.06 (1,564) 1:A:6:SER:H 1:A:6:SER:HB3 10 0.06 (1,404) 1:A:6:SER:H 1:A:6:SER:HB3 10 0.06 (1,407) 1:A:76:ARG:HA 1:A:70:YS:HG 13 0.06 (1,407) 1:A:76:ARG:HA 1:A:76:ARG:HG3 7 0.06 (1,407) 1:A:76:ARG:HA 1:A:76:ARG:HG3 7 0.06 (1,295) 1:A:80:GLU:HA 1:A:80:GLU:HG3 7 0.06 (1,295) 1:A:80:GLU:HA 1:A:80:GLU:HG3 13 0.06 (1,295) 1:A:106:LYS:HB2 1:A:107:CYS:H 12 0.06 (1,1571) 1:A:57:PHE:HB2 1:A:51:PHE:HB2 3 0.06 (1,1571) 1:A:57:PHE:HB2 1:A:51:PHE:HB3 3 0.06 (1,1571) 1:A:57:PHE:HB3 1:A:51:PHE:HB3 16 0.06 (1,1571) 1:A:57:PHE:HB3 1:A:51:PHE:HB3 19 0.06	(1,94)	1:A:63:PRO:HB3	1:A:68:LEU:HD12	30	0.06
(1,82)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:64:LEU:HD22         6         0.06           (1,82)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:64:LEU:HD23         6         0.06           (1,699)         1:A:77:ASP:HB3         1:A:80:GLU:HB2         8         0.06           (1,699)         1:A:77:ASP:HB3         1:A:80:GLU:HB3         8         0.06           (1,565)         1:A:43:THR:HG21         1:A:38:PRO:HD3         18         0.06           (1,565)         1:A:43:THR:HG22         1:A:38:PRO:HD3         18         0.06           (1,564)         1:A:6:SER:H         1:A:6:SER:HB3         10         0.06           (1,564)         1:A:6:SER:H         1:A:6:SER:HB3         10         0.06           (1,475)         1:A:110:LYS:HA         1:A:110:LYS:HG3         4         0.06           (1,475)         1:A:110:LYS:HA         1:A:76:ARG:HB3         21         0.06           (1,477)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         7         0.06           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         7         0.06           (1,384)         1:A:76:LRG:HB3         1:A:76:LRG:HB3         1:A:70:LRG:HB3         1:A:71:GLN:H         5         0.06           (1,295)         1	(1,94)	1:A:63:PRO:HB3	1:A:68:LEU:HD13	30	0.06
(1,82)         1:A:61:GLU:HB3         1:A:64:LEU:HD23         6         0.06           (1,699)         1:A:77:ASP:HB3         1:A:80:GLU:HB2         8         0.06           (1,699)         1:A:77:ASP:HB3         1:A:80:GLU:HB3         8         0.06           (1,565)         1:A:43:THR:HG21         1:A:38:PRO:HD3         18         0.06           (1,565)         1:A:43:THR:HG22         1:A:38:PRO:HD3         18         0.06           (1,565)         1:A:43:THR:HG23         1:A:38:PRO:HD3         18         0.06           (1,564)         1:A:6:SER:H         1:A:36:SER:HB3         10         0.06           (1,475)         1:A:10:LYS:HA         1:A:110:LYS:HG3         4         0.06           (1,477)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         7         0.06           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         23         0.06           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3	(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD21	6	0.06
(1,699)         1:A:77:ASP:HB3         1:A:80:GLU:HB2         8         0.06           (1,699)         1:A:77:ASP:HB3         1:A:80:GLU:HB3         8         0.06           (1,565)         1:A:43:THR:HG21         1:A:38:PRO:HD3         18         0.06           (1,565)         1:A:43:THR:HG22         1:A:38:PRO:HD3         18         0.06           (1,564)         1:A:6:SER:H         1:A:6:SER:HB3         10         0.06           (1,564)         1:A:6:SER:H         1:A:6:SER:HB3         21         0.06           (1,564)         1:A:6:SER:H         1:A:6:SER:HB3         21         0.06           (1,475)         1:A:110:LYS:HA         1:A:110:LYS:HG3         4         0.06           (1,475)         1:A:110:LYS:HA         1:A:76:ARG:HG3         7         0.06           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         7         0.06           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         23         0.06           (1,384)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:71:GLN:H         5         0.06           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         7         0.06           (1,289)         1:A:10:CLYS:HB2         1:A:10:TCYS:H         12 <td>(1,82)</td> <td>1:A:61:GLU:HB3</td> <td>1:A:64:LEU:HD22</td> <td>6</td> <td>0.06</td>	(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD22	6	0.06
(1,699)         1:A:77:ASP:HB3         1:A:80:GLU:HB3         8         0.06           (1,565)         1:A:43:THR:HG21         1:A:38:PRO:HD3         18         0.06           (1,565)         1:A:43:THR:HG22         1:A:38:PRO:HD3         18         0.06           (1,565)         1:A:43:THR:HG23         1:A:38:PRO:HD3         18         0.06           (1,564)         1:A:6:SER:H         1:A:6:SER:HB3         10         0.06           (1,564)         1:A:6:SER:H         1:A:6:SER:HB3         21         0.06           (1,475)         1:A:10:LYS:HA         1:A:110:LYS:HG3         4         0.06           (1,475)         1:A:110:LYS:HA         1:A:76:ARG:HG3         4         0.06           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         7         0.06           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         23         0.06           (1,384)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:71:GLN:H         5         0.06           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         7         0.06           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         7         0.06           (1,289)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:107:CYS:H         12	(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD23	6	0.06
(1,565)         1:A:43:THR:HG21         1:A:38:PRO:HD3         18         0.06           (1,565)         1:A:43:THR:HG22         1:A:38:PRO:HD3         18         0.06           (1,565)         1:A:43:THR:HG23         1:A:38:PRO:HD3         18         0.06           (1,564)         1:A:6:SER:H         1:A:6:SER:HB3         10         0.06           (1,564)         1:A:6:SER:H         1:A:6:SER:HB3         21         0.06           (1,475)         1:A:110:LYS:HA         1:A:110:LYS:HG3         4         0.06           (1,475)         1:A:110:LYS:HA         1:A:110:LYS:HG3         4         0.06           (1,471)         1:A:65:VAL:H         1:A:65:VAL:HB         13         0.06           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         7         0.06           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         23         0.06           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         23         0.06           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:CARG:HG3         7         0.06           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:71:GLN:H         5         0.06           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         13	(1,699)	1:A:77:ASP:HB3	1:A:80:GLU:HB2	8	0.06
(1,565)         1:A:43:THR:HG22         1:A:38:PRO:HD3         18         0.06           (1,565)         1:A:43:THR:HG23         1:A:38:PRO:HD3         18         0.06           (1,564)         1:A:6:SER:H         1:A:6:SER:HB3         10         0.06           (1,564)         1:A:6:SER:H         1:A:6:SER:HB3         21         0.06           (1,475)         1:A:110:LYS:HA         1:A:110:LYS:HG3         4         0.06           (1,471)         1:A:65:VAL:H         1:A:65:VAL:HB         13         0.06           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         7         0.06           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         7         0.06           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         23         0.06           (1,384)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:71:GLN:H         5         0.06           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         7         0.06           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         13         0.06           (1,289)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:107:CYS:H         12         0.06           (1,289)         1:A:166:LYS:HB2         1:A:107:CYS:H         16 </td <td>(1,699)</td> <td>1:A:77:ASP:HB3</td> <td>1:A:80:GLU:HB3</td> <td>8</td> <td>0.06</td>	(1,699)	1:A:77:ASP:HB3	1:A:80:GLU:HB3	8	0.06
(1,565)         1:A:43:THR:HG23         1:A:38:PRO:HD3         18         0.06           (1,564)         1:A:6:SER:H         1:A:6:SER:HB3         10         0.06           (1,564)         1:A:6:SER:H         1:A:6:SER:HB3         21         0.06           (1,475)         1:A:110:LYS:HA         1:A:110:LYS:HG3         4         0.06           (1,411)         1:A:65:VAL:H         1:A:65:VAL:HB         13         0.06           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         7         0.06           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         23         0.06           (1,407)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:71:GLN:H         5         0.06           (1,384)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:71:GLN:H         5         0.06           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         7         0.06           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         13         0.06           (1,289)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:107:CYS:H         12         0.06           (1,289)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:107:CYS:H         16         0.06           (1,1571)         1:A:3:7:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         3 <td>(1,565)</td> <td>1:A:43:THR:HG21</td> <td>1:A:38:PRO:HD3</td> <td>18</td> <td>0.06</td>	(1,565)	1:A:43:THR:HG21	1:A:38:PRO:HD3	18	0.06
(1,564)         1:A:6:SER:H         1:A:6:SER:HB3         10         0.06           (1,564)         1:A:6:SER:H         1:A:6:SER:HB3         21         0.06           (1,475)         1:A:110:LYS:HA         1:A:110:LYS:HG3         4         0.06           (1,471)         1:A:65:VAL:H         1:A:65:VAL:HB         13         0.06           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         7         0.06           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         23         0.06           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         23         0.06           (1,384)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:71:GLN:H         5         0.06           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         7         0.06           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         13         0.06           (1,289)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:107:CYS:H         12         0.06           (1,289)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:107:CYS:H         16         0.06           (1,169)         1:A:3:PHE:HB2         1:A:107:CYS:H         16         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         3	(1,565)	1:A:43:THR:HG22	1:A:38:PRO:HD3	18	0.06
(1,564)         1:A:6:SER:H         1:A:6:SER:HB3         21         0.06           (1,475)         1:A:110:LYS:HA         1:A:110:LYS:HG3         4         0.06           (1,411)         1:A:65:VAL:H         1:A:65:VAL:HB         13         0.06           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         7         0.06           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         23         0.06           (1,384)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:71:GLN:H         5         0.06           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         7         0.06           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         13         0.06           (1,289)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:107:CYS:H         12         0.06           (1,289)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:107:CYS:H         16         0.06           (1,169)         1:A:3:PHE:HB         1:A:2:GLU:HB2         30         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         16	(1,565)	1:A:43:THR:HG23	1:A:38:PRO:HD3	18	0.06
(1,475)         1:A:110:LYS:HA         1:A:110:LYS:HG3         4         0.06           (1,411)         1:A:65:VAL:H         1:A:65:VAL:HB         13         0.06           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         7         0.06           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         23         0.06           (1,384)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:71:GLN:H         5         0.06           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         7         0.06           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         7         0.06           (1,289)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:107:CYS:H         12         0.06           (1,289)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:107:CYS:H         16         0.06           (1,169)         1:A:3:PHE:HB         1:A:2:GLU:HB2         30         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         16         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3 <t< td=""><td>(1,564)</td><td>1:A:6:SER:H</td><td>1:A:6:SER:HB3</td><td>10</td><td>0.06</td></t<>	(1,564)	1:A:6:SER:H	1:A:6:SER:HB3	10	0.06
(1,411)         1:A:65:VAL:H         1:A:65:VAL:HB         13         0.06           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         7         0.06           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         23         0.06           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         23         0.06           (1,384)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:71:GLN:H         5         0.06           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         7         0.06           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         13         0.06           (1,289)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:107:CYS:H         12         0.06           (1,289)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:107:CYS:H         16         0.06           (1,169)         1:A:3:PHE:H         1:A:2:GLU:HB2         30         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         16         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3 <td< td=""><td>(1,564)</td><td>1:A:6:SER:H</td><td>1:A:6:SER:HB3</td><td>21</td><td>0.06</td></td<>	(1,564)	1:A:6:SER:H	1:A:6:SER:HB3	21	0.06
(1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         7         0.06           (1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         23         0.06           (1,384)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:71:GLN:H         5         0.06           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         7         0.06           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         13         0.06           (1,289)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:107:CYS:H         12         0.06           (1,289)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:107:CYS:H         16         0.06           (1,169)         1:A:3:PHE:H         1:A:2:GLU:HB2         30         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         16         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         16         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3	(1,475)	1:A:110:LYS:HA	1:A:110:LYS:HG3	4	0.06
(1,407)         1:A:76:ARG:HA         1:A:76:ARG:HG3         23         0.06           (1,384)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:71:GLN:H         5         0.06           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         7         0.06           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         13         0.06           (1,289)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:107:CYS:H         12         0.06           (1,289)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:107:CYS:H         16         0.06           (1,169)         1:A:3:PHE:H         1:A:2:GLU:HB2         30         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         16         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         16         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         16         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3	(1,411)	1:A:65:VAL:H	1:A:65:VAL:HB	13	0.06
(1,384)         1:A:70:HIS:HB3         1:A:71:GLN:H         5         0.06           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         7         0.06           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         13         0.06           (1,289)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:107:CYS:H         12         0.06           (1,289)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:107:CYS:H         16         0.06           (1,169)         1:A:3:PHE:H         1:A:2:GLU:HB2         30         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         16         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3	(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	7	0.06
(1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         7         0.06           (1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         13         0.06           (1,289)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:107:CYS:H         12         0.06           (1,289)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:107:CYS:H         16         0.06           (1,169)         1:A:3:PHE:H         1:A:2:GLU:HB2         30         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         16         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3 <td>(1,407)</td> <td>1:A:76:ARG:HA</td> <td>1:A:76:ARG:HG3</td> <td>23</td> <td>0.06</td>	(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	23	0.06
(1,295)         1:A:80:GLU:HA         1:A:80:GLU:HG3         13         0.06           (1,289)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:107:CYS:H         12         0.06           (1,289)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:107:CYS:H         16         0.06           (1,169)         1:A:3:PHE:H         1:A:2:GLU:HB2         30         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         16         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         19         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3<	(1,384)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:71:GLN:H	5	0.06
(1,289)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:107:CYS:H         12         0.06           (1,289)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:107:CYS:H         16         0.06           (1,169)         1:A:3:PHE:H         1:A:2:GLU:HB2         30         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB2         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         16         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         16         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         16         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         19         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         19         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         19         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB	(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	7	0.06
(1,289)         1:A:106:LYS:HB2         1:A:107:CYS:H         16         0.06           (1,169)         1:A:3:PHE:H         1:A:2:GLU:HB2         30         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB2         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         16         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         16         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         16         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         16         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         19         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         19         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         19         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:H	(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	13	0.06
(1,169)         1:A:3:PHE:H         1:A:2:GLU:HB2         30         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB2         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB2         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         3         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         16         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         16         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         16         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:HB3         16         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB2         1:A:51:PHE:HB3         19         0.06           (1,1571)         1:A:57:PHE:HB3         1:A:51:PHE:	(1,289)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:107:CYS:H	12	0.06
(1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB2       3       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       3       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       3       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       3       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB2       16       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       16       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       16       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       16       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1561)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:20:SER:HB2       12       0.06         (1,1561)       1:A:19:VAL:HG11	(1,289)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:107:CYS:H	16	0.06
(1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       3       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       3       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       3       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB2       16       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       16       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       16       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       16       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1561)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:20:SER:HB2       12       0.06         (1,1561)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:20:SER:HB3       12       0.06	(1,169)	1:A:3:PHE:H	1:A:2:GLU:HB2	30	0.06
(1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       3       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       3       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB2       16       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       16       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       16       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       16       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB2       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1561)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:20:SER:HB2       12       0.06         (1,1561)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:20:SER:HB3       12       0.06	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	3	0.06
(1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       3       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB2       16       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       16       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       16       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       16       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB2       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1561)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:20:SER:HB2       12       0.06         (1,1561)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:20:SER:HB3       12       0.06	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	3	0.06
(1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB2       16       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       16       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       16       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       16       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB2       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1561)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:20:SER:HB2       12       0.06         (1,1561)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:20:SER:HB3       12       0.06	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	3	0.06
(1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       16       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       16       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       16       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB2       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1561)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:20:SER:HB2       12       0.06         (1,1561)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:20:SER:HB3       12       0.06	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	3	0.06
(1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       16       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       16       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB2       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1561)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:20:SER:HB2       12       0.06         (1,1561)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:20:SER:HB3       12       0.06	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	16	0.06
(1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       16       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB2       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1561)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:20:SER:HB2       12       0.06         (1,1561)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:20:SER:HB3       12       0.06	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	16	0.06
(1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB2       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1561)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:20:SER:HB2       12       0.06         (1,1561)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:20:SER:HB3       12       0.06	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	16	0.06
(1,1571)       1:A:57:PHE:HB2       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1561)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:20:SER:HB2       12       0.06         (1,1561)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:20:SER:HB3       12       0.06	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	16	0.06
(1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB2       19       0.06         (1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1561)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:20:SER:HB2       12       0.06         (1,1561)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:20:SER:HB3       12       0.06	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	19	0.06
(1,1571)       1:A:57:PHE:HB3       1:A:51:PHE:HB3       19       0.06         (1,1561)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:20:SER:HB2       12       0.06         (1,1561)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:20:SER:HB3       12       0.06	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	19	0.06
(1,1561)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:20:SER:HB2       12       0.06         (1,1561)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:20:SER:HB3       12       0.06	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	19	0.06
(1,1561) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:20:SER:HB3 12 0.06	(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	19	0.06
	(1,1561)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:20:SER:HB2	12	0.06
(1.1561) $1.4.10.VAI.HC12$ $1.4.20.QEP.HP2$ 12	(1,1561)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:20:SER:HB3	12	0.06
(1,1001) 1.A.13.VAL.HG12   1.A.20.SER.HD2   12   0.00	(1,1561)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:20:SER:HB2	12	0.06
(1,1561) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:20:SER:HB3 12 0.06	(1,1561)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:20:SER:HB3	12	0.06
(1,1561) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:20:SER:HB2 12 0.06	(1,1561)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:20:SER:HB2	12	0.06
(1,1561) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:20:SER:HB3 12 0.06	(1,1561)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:20:SER:HB3	12	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:20:SER:HB2	25	0.06
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:20:SER:HB3	25	0.06
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:20:SER:HB2	25	0.06
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:20:SER:HB3	25	0.06
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:20:SER:HB2	25	0.06
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:20:SER:HB3	25	0.06
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH11	13	0.06
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH12	13	0.06
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH21	13	0.06
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH22	13	0.06
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	21	0.06
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	21	0.06
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	21	0.06
(1,1201)	1:A:50:VAL:H	1:A:50:VAL:HG21	18	0.06
(1,1201)	1:A:50:VAL:H	1:A:50:VAL:HG22	18	0.06
(1,1201)	1:A:50:VAL:H	1:A:50:VAL:HG23	18	0.06
(1,1076)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:71:GLN:HE22	7	0.06
(1,1076)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:71:GLN:HE22	7	0.06
(1,1076)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:71:GLN:HE22	7	0.06
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	24	0.06
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	24	0.06
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	24	0.06
(1,1009)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:91:LYS:H	5	0.06
(1,1009)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:91:LYS:H	14	0.06
(1,983)	1:A:50:VAL:H	1:A:50:VAL:HG11	28	0.05
(1,983)	1:A:50:VAL:H	1:A:50:VAL:HG12	28	0.05
(1,983)	1:A:50:VAL:H	1:A:50:VAL:HG13	28	0.05
(1,865)	1:A:91:LYS:H	1:A:90:ASP:HB2	6	0.05
(1,865)	1:A:91:LYS:H	1:A:90:ASP:HB3	6	0.05
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD21	20	0.05
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD22	20	0.05
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD23	20	0.05
(1,565)	1:A:43:THR:HG21	1:A:38:PRO:HD3	23	0.05
(1,565)	1:A:43:THR:HG22	1:A:38:PRO:HD3	23	0.05
(1,565)	1:A:43:THR:HG23	1:A:38:PRO:HD3	23	0.05
(1,564)	1:A:6:SER:H	1:A:6:SER:HB3	7	0.05
(1,521)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:103:ARG:HA	18	0.05
(1,521)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:103:ARG:HA	29	0.05
(1,315)	1:A:36:GLU:HG3	1:A:36:GLU:HA	21	0.05
(1,289)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:107:CYS:H	13	0.05
(1,289)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:107:CYS:H	17	0.05
(1,289)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:107:CYS:H	21	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,248)	1:A:45:CYS:HB3	1:A:45:CYS:H	25	0.05
(1,169)	1:A:3:PHE:H	1:A:2:GLU:HB2	3	0.05
(1,1611)	1:A:14:TYR:H	1:A:10:ASP:O	28	0.05
(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH11	11	0.05
(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH12	11	0.05
(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH21	11	0.05
(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH22	11	0.05
(1,145)	1:A:95:ASN:HA	1:A:92:ASN:HD22	1	0.05
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	5	0.05
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	16	0.05
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	16	0.05
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	16	0.05
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	3	0.05
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	3	0.05
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	3	0.05
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	13	0.05
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	13	0.05
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	13	0.05
(1,1170)	1:A:63:PRO:HD3	1:A:63:PRO:HB2	17	0.05
(1,1170)	1:A:63:PRO:HD3	1:A:63:PRO:HB2	22	0.05
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG21	5	0.05
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG22	5	0.05
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG23	5	0.05
(1,1104)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:65:VAL:HG11	11	0.05
(1,1104)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:65:VAL:HG12	11	0.05
(1,1104)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:65:VAL:HG13	11	0.05
(1,1025)	1:A:64:LEU:H	1:A:64:LEU:HD21	10	0.05
(1,1025)	1:A:64:LEU:H	1:A:64:LEU:HD22	10	0.05
(1,1025)	1:A:64:LEU:H	1:A:64:LEU:HD23	10	0.05
(1,1009)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:91:LYS:H	11	0.05
(1,1009)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:91:LYS:H	12	0.05
(1,1009)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:91:LYS:H	20	0.05
(1,988)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HG2	1	0.04
(1,988)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HG2	23	0.04
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD21	1	0.04
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD22	1	0.04
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD23	1	0.04
(1,815)	1:A:122:LYS:HB2	1:A:122:LYS:HA	11	0.04
(1,699)	1:A:77:ASP:HB3	1:A:80:GLU:HB2	26	0.04
(1,699)	1:A:77:ASP:HB3	1:A:80:GLU:HB3	26	0.04
(1,674)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:32:PHE:HE1	2	0.04
(1,674)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:32:PHE:HE2	2	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,564)	1:A:6:SER:H	1:A:6:SER:HB3	4	0.04
(1,564)	1:A:6:SER:H	1:A:6:SER:HB3	25	0.04
(1,521)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:103:ARG:HA	10	0.04
(1,500)	1:A:43:THR:H	1:A:43:THR:HG1	1	0.04
(1,475)	1:A:110:LYS:HA	1:A:110:LYS:HG3	26	0.04
(1,475)	1:A:110:LYS:HA	1:A:110:LYS:HG3	27	0.04
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	11	0.04
(1,314)	1:A:85:VAL:H	1:A:85:VAL:HG11	10	0.04
(1,314)	1:A:85:VAL:H	1:A:85:VAL:HG12	10	0.04
(1,314)	1:A:85:VAL:H	1:A:85:VAL:HG13	10	0.04
(1,289)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:107:CYS:H	6	0.04
(1,289)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:107:CYS:H	18	0.04
(1,26)	1:A:9:GLU:HA	1:A:9:GLU:HG2	1	0.04
(1,26)	1:A:9:GLU:HA	1:A:9:GLU:HG3	1	0.04
(1,248)	1:A:45:CYS:HB3	1:A:45:CYS:H	1	0.04
(1,248)	1:A:45:CYS:HB3	1:A:45:CYS:H	2	0.04
(1,248)	1:A:45:CYS:HB3	1:A:45:CYS:H	5	0.04
(1,248)	1:A:45:CYS:HB3	1:A:45:CYS:H	9	0.04
(1,248)	1:A:45:CYS:HB3	1:A:45:CYS:H	10	0.04
(1,248)	1:A:45:CYS:HB3	1:A:45:CYS:H	11	0.04
(1,248)	1:A:45:CYS:HB3	1:A:45:CYS:H	12	0.04
(1,248)	1:A:45:CYS:HB3	1:A:45:CYS:H	13	0.04
(1,248)	1:A:45:CYS:HB3	1:A:45:CYS:H	16	0.04
(1,248)	1:A:45:CYS:HB3	1:A:45:CYS:H	18	0.04
(1,248)	1:A:45:CYS:HB3	1:A:45:CYS:H	19	0.04
(1,248)	1:A:45:CYS:HB3	1:A:45:CYS:H	20	0.04
(1,248)	1:A:45:CYS:HB3	1:A:45:CYS:H	21	0.04
(1,248)	1:A:45:CYS:HB3	1:A:45:CYS:H	24	0.04
(1,248)	1:A:45:CYS:HB3	1:A:45:CYS:H	26	0.04
(1,248)	1:A:45:CYS:HB3	1:A:45:CYS:H	27	0.04
(1,248)	1:A:45:CYS:HB3	1:A:45:CYS:H	28	0.04
(1,248)	1:A:45:CYS:HB3	1:A:45:CYS:H	29	0.04
(1,248)	1:A:45:CYS:HB3	1:A:45:CYS:H	30	0.04
(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	10	0.04
(1,194)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:6:SER:HB2	10	0.04
(1,194)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:6:SER:HB2	10	0.04
(1,169)	1:A:3:PHE:H	1:A:2:GLU:HB2	4	0.04
(1,1611)	1:A:14:TYR:H	1:A:10:ASP:O	9	0.04
(1,1482)	1:A:48:LYS:H	1:A:48:LYS:HG2	23	0.04
(1,1482)	1:A:48:LYS:H	1:A:48:LYS:HG3	23	0.04
(1,1478)	1:A:9:GLU:HA	1:A:8:THR:HG21	11	0.04
(1,1478)	1:A:9:GLU:HA	1:A:8:THR:HG22	11	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1478)	1:A:9:GLU:HA	1:A:8:THR:HG23	11	0.04
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB2	24	0.04
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB3	24	0.04
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB2	24	0.04
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB3	24	0.04
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB2	24	0.04
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB3	24	0.04
(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD11	5	0.04
(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD12	5	0.04
(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD13	5	0.04
(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD11	5	0.04
(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD12	5	0.04
(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD13	5	0.04
(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD11	5	0.04
(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD12	5	0.04
(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD13	5	0.04
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	5	0.04
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	5	0.04
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	5	0.04
(1,1183)	1:A:13:ARG:HG3	1:A:13:ARG:HD2	4	0.04
(1,1183)	1:A:13:ARG:HG3	1:A:13:ARG:HD2	12	0.04
(1,1183)	1:A:13:ARG:HG3	1:A:13:ARG:HD2	18	0.04
(1,1183)	1:A:13:ARG:HG3	1:A:13:ARG:HD2	26	0.04
(1,1170)	1:A:63:PRO:HD3	1:A:63:PRO:HB2	9	0.04
(1,1170)	1:A:63:PRO:HD3	1:A:63:PRO:HB2	12	0.04
(1,1148)	1:A:16:THR:H	1:A:15:ARG:HB2	26	0.04
(1,1148)	1:A:16:THR:H	1:A:15:ARG:HB3	26	0.04
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG21	6	0.04
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG22	6	0.04
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG23	6	0.04
(1,1122)	1:A:14:TYR:HD1	1:A:11:LEU:HD11	16	0.04
(1,1122)	1:A:14:TYR:HD1	1:A:11:LEU:HD12	16	0.04
(1,1122)	1:A:14:TYR:HD1	1:A:11:LEU:HD13	16	0.04
(1,1122)	1:A:14:TYR:HD2	1:A:11:LEU:HD11	16	0.04
(1,1122)	1:A:14:TYR:HD2	1:A:11:LEU:HD12	16	0.04
(1,1122)	1:A:14:TYR:HD2	1:A:11:LEU:HD13	16	0.04
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	4	0.04
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	4	0.04
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	4	0.04
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	20	0.04
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	20	0.04
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	20	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	23	0.04
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	23	0.04
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	23	0.04
(1,988)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HG2	9	0.03
(1,988)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HG2	13	0.03
(1,865)	1:A:91:LYS:H	1:A:90:ASP:HB2	20	0.03
(1,865)	1:A:91:LYS:H	1:A:90:ASP:HB3	20	0.03
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD21	15	0.03
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD22	15	0.03
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD23	15	0.03
(1,556)	1:A:36:GLU:HG2	1:A:36:GLU:HA	11	0.03
(1,521)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:103:ARG:HA	21	0.03
(1,521)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:103:ARG:HA	30	0.03
(1,505)	1:A:24:ILE:H	1:A:24:ILE:HG12	2	0.03
(1,49)	1:A:20:SER:H	1:A:20:SER:HB2	14	0.03
(1,49)	1:A:20:SER:H	1:A:20:SER:HB3	14	0.03
(1,433)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD3	30	0.03
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	10	0.03
(1,315)	1:A:36:GLU:HG3	1:A:36:GLU:HA	25	0.03
(1,289)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:107:CYS:H	7	0.03
(1,289)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:107:CYS:H	22	0.03
(1,289)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:107:CYS:H	25	0.03
(1,248)	1:A:45:CYS:HB3	1:A:45:CYS:H	3	0.03
(1,248)	1:A:45:CYS:HB3	1:A:45:CYS:H	4	0.03
(1,248)	1:A:45:CYS:HB3	1:A:45:CYS:H	8	0.03
(1,248)	1:A:45:CYS:HB3	1:A:45:CYS:H	15	0.03
(1,248)	1:A:45:CYS:HB3	1:A:45:CYS:H	22	0.03
(1,248)	1:A:45:CYS:HB3	1:A:45:CYS:H	23	0.03
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	3	0.03
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	3	0.03
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	3	0.03
(1,169)	1:A:3:PHE:H	1:A:2:GLU:HB2	22	0.03
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	1	0.03
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	1	0.03
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	1	0.03
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	1	0.03
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	24	0.03
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	24	0.03
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	24	0.03
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	24	0.03
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH11	26	0.03
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH12	26	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH21	26	0.03
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH22	26	0.03
(1,1393)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD2	24	0.03
(1,1391)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:78:ALA:HA	28	0.03
(1,1391)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:78:ALA:HA	28	0.03
(1,1391)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:78:ALA:HA	28	0.03
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	8	0.03
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	8	0.03
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	8	0.03
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	18	0.03
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	18	0.03
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	18	0.03
(1,1183)	1:A:13:ARG:HG3	1:A:13:ARG:HD2	9	0.03
(1,1183)	1:A:13:ARG:HG3	1:A:13:ARG:HD2	13	0.03
(1,1183)	1:A:13:ARG:HG3	1:A:13:ARG:HD2	19	0.03
(1,1183)	1:A:13:ARG:HG3	1:A:13:ARG:HD2	20	0.03
(1,1183)	1:A:13:ARG:HG3	1:A:13:ARG:HD2	30	0.03
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	24	0.03
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	24	0.03
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	24	0.03
(1,1170)	1:A:63:PRO:HD3	1:A:63:PRO:HB2	1	0.03
(1,1170)	1:A:63:PRO:HD3	1:A:63:PRO:HB2	5	0.03
(1,1170)	1:A:63:PRO:HD3	1:A:63:PRO:HB2	6	0.03
(1,1170)	1:A:63:PRO:HD3	1:A:63:PRO:HB2	7	0.03
(1,1170)	1:A:63:PRO:HD3	1:A:63:PRO:HB2	10	0.03
(1,1170)	1:A:63:PRO:HD3	1:A:63:PRO:HB2	13	0.03
(1,1170)	1:A:63:PRO:HD3	1:A:63:PRO:HB2	27	0.03
(1,1170)	1:A:63:PRO:HD3	1:A:63:PRO:HB2	29	0.03
(1,1170)	1:A:63:PRO:HD3	1:A:63:PRO:HB2	30	0.03
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG21	4	0.03
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG22	4	0.03
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG23	4	0.03
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG21	18	0.03
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG22	18	0.03
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG23	18	0.03
(1,1001)	1:A:116:ILE:H	1:A:115:LEU:HB2	28	0.03
(1,988)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HG2	2	0.02
(1,961)	1:A:41:ASP:H	1:A:40:ASP:HB2	22	0.02
(1,928)	1:A:16:THR:HA	1:A:19:VAL:HB	5	0.02
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD21	9	0.02
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD22	9	0.02
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD23	9	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,729)	1:A:91:LYS:H	1:A:91:LYS:HG3	5	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	1	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	1	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	1	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	2	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	2	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	2	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	3	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	3	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	3	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	4	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	4	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	4	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	5	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	5	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	5	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	7	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	7	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	7	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	8	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	8	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	8	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	9	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	9	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	9	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	10	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	10	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	10	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	11	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	11	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	11	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	12	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	12	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	12	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	13	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	13	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	13	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	15	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	15	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	15	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	16	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	16	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,707)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	16	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	17	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	17	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	17	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	18	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	18	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	18	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	19	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	19	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	19	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	20	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	20	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	20	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	21	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	21	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	21	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	22	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	22	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	22	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	23	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	23	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	23	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	24	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	24	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	24	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	25	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	25	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	25	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	26	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	26	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	26	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	27	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	27	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	27	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	28	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	28	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	28	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	29	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	29	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	29	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	30	0.02
(1,707)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	30	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,707)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	30	0.02
(1,565)	1:A:43:THR:HG21	1:A:38:PRO:HD3	25	0.02
(1,565)	1:A:43:THR:HG22	1:A:38:PRO:HD3	25	0.02
(1,565)	1:A:43:THR:HG23	1:A:38:PRO:HD3	25	0.02
(1,564)	1:A:6:SER:H	1:A:6:SER:HB3	2	0.02
(1,564)	1:A:6:SER:H	1:A:6:SER:HB3	3	0.02
(1,564)	1:A:6:SER:H	1:A:6:SER:HB3	14	0.02
(1,564)	1:A:6:SER:H	1:A:6:SER:HB3	17	0.02
(1,505)	1:A:24:ILE:H	1:A:24:ILE:HG12	17	0.02
(1,505)	1:A:24:ILE:H	1:A:24:ILE:HG12	26	0.02
(1,49)	1:A:20:SER:H	1:A:20:SER:HB2	27	0.02
(1,49)	1:A:20:SER:H	1:A:20:SER:HB3	27	0.02
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	29	0.02
(1,324)	1:A:16:THR:HB	1:A:16:THR:H	2	0.02
(1,289)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:107:CYS:H	1	0.02
(1,289)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:107:CYS:H	2	0.02
(1,289)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:107:CYS:H	3	0.02
(1,289)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:107:CYS:H	8	0.02
(1,289)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:107:CYS:H	14	0.02
(1,248)	1:A:45:CYS:HB3	1:A:45:CYS:H	17	0.02
(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	1	0.02
(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	12	0.02
(1,169)	1:A:3:PHE:H	1:A:2:GLU:HB2	1	0.02
(1,1408)	1:A:16:THR:HG21	1:A:19:VAL:HB	30	0.02
(1,1408)	1:A:16:THR:HG22	1:A:19:VAL:HB	30	0.02
(1,1408)	1:A:16:THR:HG23	1:A:19:VAL:HB	30	0.02
(1,1408)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HG3	30	0.02
(1,1408)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HG3	30	0.02
(1,1408)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HG3	30	0.02
(1,139)	1:A:99:HIS:HB2	1:A:100:TRP:H	1	0.02
(1,1325)	1:A:98:CYS:HA	1:A:48:LYS:HG2	14	0.02
(1,1325)	1:A:98:CYS:HA	1:A:48:LYS:HG3	14	0.02
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	28	0.02
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	28	0.02
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	28	0.02
(1,1170)	1:A:63:PRO:HD3	1:A:63:PRO:HB2	4	0.02
(1,1170)	1:A:63:PRO:HD3	1:A:63:PRO:HB2	18	0.02
(1,1170)	1:A:63:PRO:HD3	1:A:63:PRO:HB2	23	0.02
(1,1170)	1:A:63:PRO:HD3	1:A:63:PRO:HB2	28	0.02
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	17	0.02
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	17	0.02
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	17	0.02



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

( /	:A:5:VAL:HG21			Violation (Å)
(1.1000) 1	.A.5. VAL.11G21	1:A:5:VAL:H	30	0.02
(1,1069) 1	:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	30	0.02
(1,1069) 1	:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	30	0.02
(1,1063) 1	:A:82:ARG:HB2	1:A:82:ARG:HD3	23	0.02
(1,1063) 1	:A:82:ARG:HB3	1:A:82:ARG:HD3	23	0.02
(1,1009) 1	1:A:91:LYS:HB3	1:A:91:LYS:H	15	0.02
(1,1001)	1:A:116:ILE:H	1:A:115:LEU:HB2	12	0.02
(1,988)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HG2	14	0.01
(1,82) 1	:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD21	11	0.01
(1,82) 1	:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD22	11	0.01
(1,82) 1	:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD23	11	0.01
(1,729)	1:A:91:LYS:H	1:A:91:LYS:HG3	12	0.01
(1,707) 1	:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	6	0.01
(1,707) 1	:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	6	0.01
(1,707) 1	:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	6	0.01
(1,707) 1	:A:24:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HG12	14	0.01
(1,707) 1	:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HG12	14	0.01
(1,707) 1	:A:24:ILE:HG23	1:A:24:ILE:HG12	14	0.01
(1,674) 1	:A:38:PRO:HD3	1:A:32:PHE:HE1	18	0.01
(1,674) 1	:A:38:PRO:HD3	1:A:32:PHE:HE2	18	0.01
(1,565) 1:	A:43:THR:HG21	1:A:38:PRO:HD3	15	0.01
(1,565) 1:	A:43:THR:HG22	1:A:38:PRO:HD3	15	0.01
(1,565) 1:	A:43:THR:HG23	1:A:38:PRO:HD3	15	0.01
(1,564)	1:A:6:SER:H	1:A:6:SER:HB3	9	0.01
(1,564)	1:A:6:SER:H	1:A:6:SER:HB3	20	0.01
(1,564)	1:A:6:SER:H	1:A:6:SER:HB3	24	0.01
(1,564)	1:A:6:SER:H	1:A:6:SER:HB3	28	0.01
(1,564)	1:A:6:SER:H	1:A:6:SER:HB3	30	0.01
(1,521) 1	:A:106:LYS:HB2	1:A:103:ARG:HA	6	0.01
(1,505)	1:A:24:ILE:H	1:A:24:ILE:HG12	30	0.01
(1,49)	1:A:20:SER:H	1:A:20:SER:HB2	2	0.01
(1,49)	1:A:20:SER:H	1:A:20:SER:HB3	2	0.01
	:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD3	22	0.01
( ' /	:A:106:LYS:HB2	1:A:107:CYS:H	10	0.01
(1,289) 1	:A:106:LYS:HB2	1:A:107:CYS:H	11	0.01
(1,289) 1	:A:106:LYS:HB2	1:A:107:CYS:H	19	0.01
(1,246) 1	:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	14	0.01
(1,246) 1	:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	24	0.01
(1,184) 1	:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:HA	1	0.01
(1,184) 1	:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:HA	2	0.01
(1,184) 1	:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:HA	3	0.01
(1,184) 1	:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:HA	4	0.01



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,184)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:HA	5	0.01
(1,184)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:HA	6	0.01
(1,184)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:HA	7	0.01
(1,184)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:HA	8	0.01
(1,184)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:HA	9	0.01
(1,184)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:HA	10	0.01
(1,184)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:HA	11	0.01
(1,184)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:HA	12	0.01
(1,184)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:HA	14	0.01
(1,184)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:HA	15	0.01
(1,184)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:HA	17	0.01
(1,184)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:HA	19	0.01
(1,184)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:HA	20	0.01
(1,184)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:HA	22	0.01
(1,184)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:HA	23	0.01
(1,184)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:HA	24	0.01
(1,184)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:HA	25	0.01
(1,184)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:HA	26	0.01
(1,184)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:HA	28	0.01
(1,184)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:HA	29	0.01
(1,169)	1:A:3:PHE:H	1:A:2:GLU:HB2	20	0.01
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	20	0.01
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	9	0.01
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	9	0.01
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	9	0.01
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	9	0.01
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	11	0.01
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	11	0.01
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	11	0.01
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	11	0.01
(1,1391)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:78:ALA:HA	2	0.01
(1,1391)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:78:ALA:HA	2	0.01
(1,1391)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:78:ALA:HA	2	0.01
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	8	0.01
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	8	0.01
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	8	0.01
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	11	0.01
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	11	0.01
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	11	0.01
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	15	0.01
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	15	0.01
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	Continue	0.01



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	24	0.01
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	24	0.01
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	24	0.01
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	9	0.01
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	9	0.01
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	9	0.01
(1,1170)	1:A:63:PRO:HD3	1:A:63:PRO:HB2	3	0.01
(1,1170)	1:A:63:PRO:HD3	1:A:63:PRO:HB2	14	0.01
(1,1170)	1:A:63:PRO:HD3	1:A:63:PRO:HB2	15	0.01
(1,1170)	1:A:63:PRO:HD3	1:A:63:PRO:HB2	19	0.01
(1,1170)	1:A:63:PRO:HD3	1:A:63:PRO:HB2	20	0.01
(1,1170)	1:A:63:PRO:HD3	1:A:63:PRO:HB2	21	0.01
(1,1170)	1:A:63:PRO:HD3	1:A:63:PRO:HB2	24	0.01
(1,1170)	1:A:63:PRO:HD3	1:A:63:PRO:HB2	26	0.01
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG21	9	0.01
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG22	9	0.01
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG23	9	0.01
(1,1063)	1:A:82:ARG:HB2	1:A:82:ARG:HD3	25	0.01
(1,1063)	1:A:82:ARG:HB3	1:A:82:ARG:HD3	25	0.01
(1,1063)	1:A:82:ARG:HB2	1:A:82:ARG:HD3	28	0.01
(1,1063)	1:A:82:ARG:HB3	1:A:82:ARG:HD3	28	0.01
(1,1009)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:91:LYS:H	4	0.01
(1,1009)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:91:LYS:H	25	0.01
(1,1001)	1:A:116:ILE:H	1:A:115:LEU:HB2	2	0.01
(1,1001)	1:A:116:ILE:H	1:A:115:LEU:HB2	14	0.01



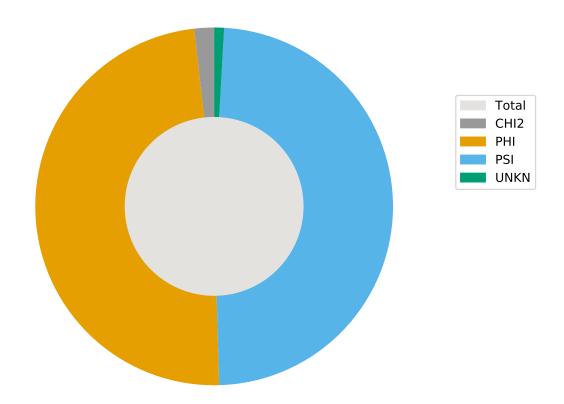
## 9 Dihedral angle restraints analysis

## 9.1 Dihedral angle restraints summary

Angle name	Count	%
CHI2	4	1.8
PHI	109	48.7
PSI	109	48.7
UNKN	2	0.9
Total	224	100.0

## 9.1.1 Pie chart : Dihedral angle restraints

There are 0 unmapped restraints



## 9.2 Dihedral angle violations

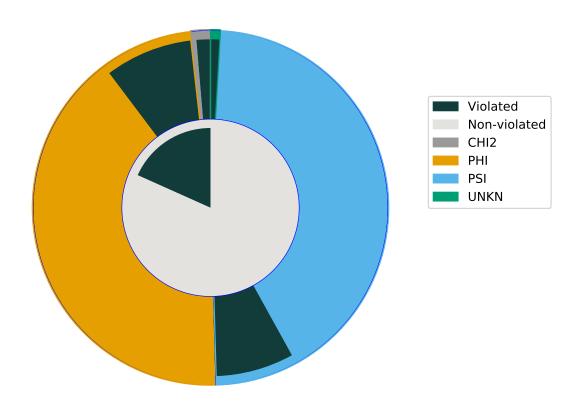
The following table provides the summary of violated restraints. Restraints that are violated at least in one model are counted as violated.



Angle name	Count	$\%^1$	$\%^2$
CHI2	3	75.0	7.3
PHI	19	17.4	46.3
PSI	17	15.6	41.5
UNKN	2	100.0	4.9
Total	41	18.3	100.0

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

### 9.2.1 Pie chart : Dihedral angle violations



# 9.3 Consistent dihedral angle violations

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

Angle name	Count	$\%^1$	$\%^2$
CHI2	2	50.0	16.7
PHI	3	2.8	25.0

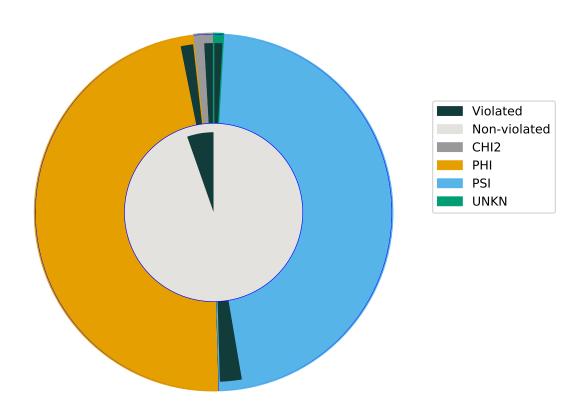
Continued on next page...



Angle name	Count	$\%^1$	$\%^2$
PSI	5	4.6	41.7
UNKN	2	100.0	16.7
Total	12	5.4	100.0

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>percentage of violated restraints in that particular angle type, <sup>2</sup>percentage of violation in total violations.

### 9.3.1 Pie chart: Consistent dihedral angle violations



# 9.4 Residual dihedral angle violations

Violation are counted in different bin sizes and listed below

Range $(\circ)$	Avg. No. of violated restraints per model	$     Max \ violation \ ( \circ )     $
0.0-5.0	7.3	4.72
5.0-10.0	2.8	9.95
10.0-20.0	3.4	19.96
20.0-40.0	4.1	39.98



Range $(\circ)$	Avg. No. of violated restraints per model	$   \text{Max violation } (\circ)   $
40.0-80.0	3.4	57.88
80.0<	None	None

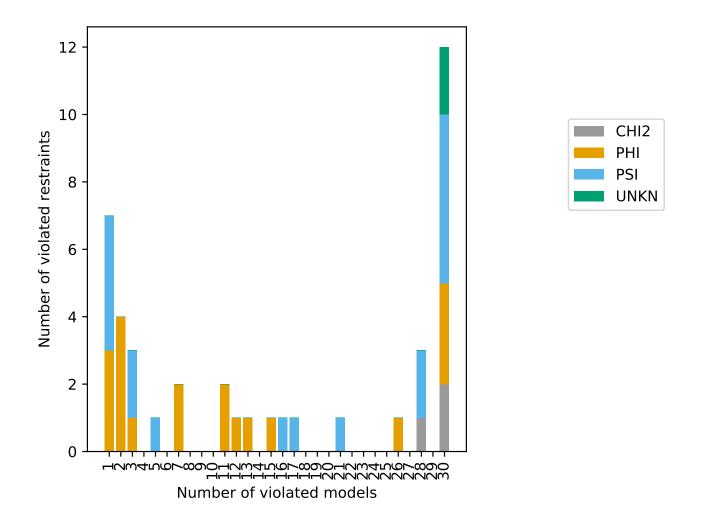
# 9.5 Dihedral angle violations in the ensemble

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

No	No. of violated restraints			NI	
CHI2	PHI	PSI	UNKN	Total	No. of violated models
0	3	4	0	7	1
0	4	0	0	4	2
0	1	2	0	3	3
0	0	0	0	0	4
0	0	1	0	1	5
0	0	0	0	0	6
0	2	0	0	2	7
0	0	0	0	0	8
0	0	0	0	0	9
0	0	0	0	0	10
0	2	0	0	2	11
0	1	0	0	1	12
0	1	0	0	1	13
0	0	0	0	0	14
0	1	0	0	1	15
0	0	1	0	1	16
0	0	1	0	1	17
0	0	0	0	0	18
0	0	0	0	0	19
0	0	0	0	0	20
0	0	1	0	1	21
0	0	0	0	0	22
0	0	0	0	0	23
0	0	0	0	0	24
0	0	0	0	0	25
0	1	0	0	1	26
0	0	0	0	0	27
1	0	2	0	3	28
0	0	0	0	0	29
2	3	5	2	12	30



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



# 9.6 Violations in each model

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

Model ID		No. of violations					Max (∘)
Model 1D	CHI2	PHI	PSI	UNKN	Total	$  \mathbf{Mean} (\circ)  $	Max (0)
1	3	10	9	2	24	15.29	50.14
2	3	6	11	2	22	15.75	44.42
3	3	6	10	2	21	17.04	47.77
4	3	6	8	2	19	18.25	51.92
5	3	8	10	2	23	14.24	50.68
6	3	6	8	2	19	20.81	57.88
7	3	7	8	2	20	16.85	51.96
8	3	6	10	2	21	17.63	49.92
9	2	9	9	2	22	16.77	47.41

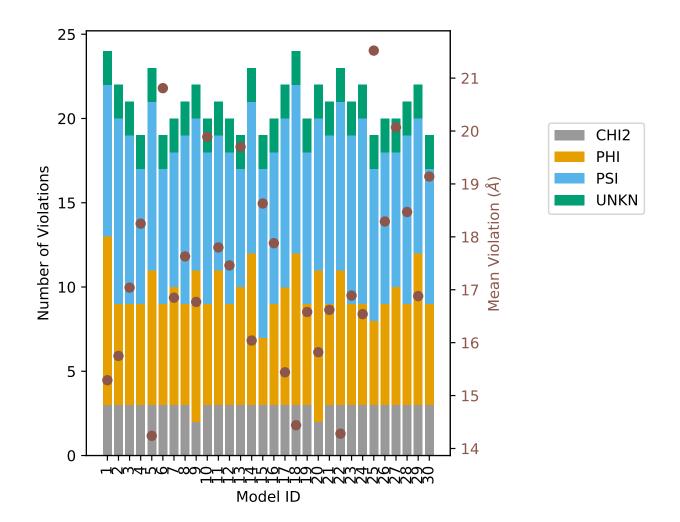


Continued from previous page...

Model ID		No.	of vic	olations		Moon (a)	Max (∘)	
Model 1D	CHI2	PHI	PSI	UNKN	Total	$  \text{Mean } (\circ)  $		
10	3	6	9	2	20	19.89	55.05	
11	3	8	8	2	21	17.8	54.98	
12	3	6	9	2	20	17.46	49.79	
13	3	7	7	2	19	19.7	50.24	
14	3	9	9	2	23	16.04	53.64	
15	3	4	10	2	19	18.63	48.21	
16	3	6	9	2	20	17.88	45.33	
17	3	7	10	2	22	15.44	45.78	
18	3	9	10	2	24	14.44	48.88	
19	3	6	9	2	20	16.58	47.61	
20	2	9	9	2	22	15.82	57.07	
21	3	6	10	2	21	16.62	50.06	
22	3	8	10	2	23	14.28	43.32	
23	3	6	10	2	21	16.89	53.86	
24	3	6	11	2	22	16.54	43.97	
25	3	5	9	2	19	21.52	49.22	
26	3	6	9	2	20	18.29	46.46	
27	3	7	8	2	20	20.07	53.31	
28	3	6	10	2	21	18.47	52.16	
29	3	9	8	2	22	16.88	56.01	
30	3	6	8	2	19	19.14	51.25	



# 9.6.1 Bar graph: Violations in each model

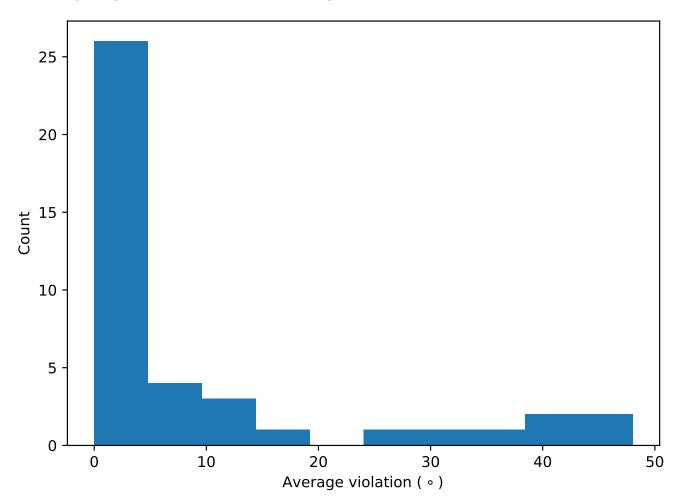




### 9.7 Most violated dihedral angle restraints

#### 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 ( ∘ )
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD2	30	8.45	10.97
(1,224)	1:A:113:LEU:CA	1:A:113:LEU:CB	1:A:113:LEU:CG	1:A:113:LEU:CD2	30	8.6	10.11
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	30	48.03	57.88
(1,110)	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	30	47.71	53.64
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	30	27.59	41.7
(1,164)	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	1:A:92:ASN:N	30	37.46	41.54
(1,4)	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	1:A:5:VAL:N	28	13.4	26.79
(1,10)	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:THR:N	30	9.29	19.96
(1,218)	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	1:A:122:LYS:N	21	6.67	17.76
(1,68)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:PHE:N	16	2.58	6.02



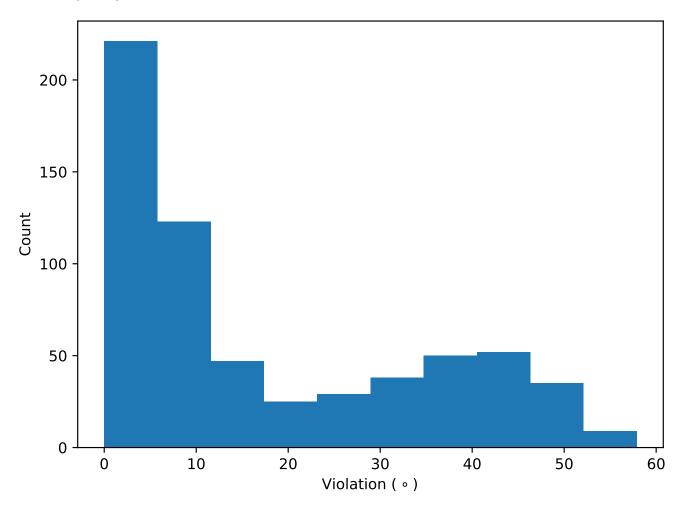
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	$\mathbf{Mean} \; (\; \circ \; )$	Max (∘)
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	28	1.92	4.21
(1,2)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	1:A:4:THR:N	1	2.08	2.08
(1,94)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:PHE:N	1	1.48	1.48
(1,168)	1:A:94:ASP:N	1:A:94:ASP:CA	1:A:94:ASP:C	1:A:95:ASN:N	1	1.15	1.15
(1,170)	1:A:95:ASN:N	1:A:95:ASN:CA	1:A:95:ASN:C	1:A:96:ASN:N	5	0.49	0.95
(1,130)	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	1:A:72:LEU:N	17	0.47	0.92
(1,160)	1:A:89:VAL:N	1:A:89:VAL:CA	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	3	0.49	0.69
(1,116)	1:A:63:PRO:N	1:A:63:PRO:CA	1:A:63:PRO:C	1:A:64:LEU:N	3	0.16	0.28
(1,20)	1:A:12:GLN:N	1:A:12:GLN:CA	1:A:12:GLN:C	1:A:13:ARG:N	1	0.22	0.22
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	30	40.49	50.46
(1,107)	1:A:56:LEU:C	1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CA	1:A:57:PHE:C	30	39.93	46.33
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	30	29.78	38.66
(1,161)	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	26	19.04	36.79
(1,157)	1:A:87:LYS:C	1:A:88:CYS:N	1:A:88:CYS:CA	1:A:88:CYS:C	1	2.15	2.15
(1,169)	1:A:94:ASP:C	1:A:95:ASN:N	1:A:95:ASN:CA	1:A:95:ASN:C	12	0.99	2.09
(1,217)	1:A:120:ILE:C	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	15	0.79	1.46
(1,163)	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	7	0.7	1.44
(1,135)	1:A:74:HIS:C	1:A:75:GLY:N	1:A:75:GLY:CA	1:A:75:GLY:C	11	0.7	1.3
(1,3)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	11	0.71	1.2
(1,129)	1:A:70:HIS:C	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	13	0.53	1.16
(1,37)	1:A:20:SER:C	1:A:21:SER:N	1:A:21:SER:CA	1:A:21:SER:C	3	0.46	0.75
(1,5)	1:A:4:THR:C	1:A:5:VAL:N	1:A:5:VAL:CA	1:A:5:VAL:C	2	0.34	0.35
(1,69)	1:A:36:GLU:C	1:A:37:PHE:N	1:A:37:PHE:CA	1:A:37:PHE:C	7	0.14	0.34
(1,165)	1:A:92:ASN:C	1:A:93:THR:N	1:A:93:THR:CA	1:A:93:THR:C	2	0.28	0.33
(1,199)	1:A:110:LYS:C	1:A:111:ASN:N	1:A:111:ASN:CA	1:A:111:ASN:C	2	0.27	0.29
(1,9)	1:A:6:SER:C	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1	0.26	0.26
(1,15)	1:A:9:GLU:C	1:A:10:ASP:N	1:A:10:ASP:CA	1:A:10:ASP:C	2	0.2	0.24
(1,215)	1:A:119:SER:C	1:A:120:ILE:N	1:A:120:ILE:CA	1:A:120:ILE:C	1	0.01	0.01
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	30	13.0	14.81
(1,220)	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:CB	1:A:56:LEU:CG	1:A:56:LEU:CD1	30	11.05	14.24
(1,223)	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:CB	1:A:86:LEU:CG	1:A:86:LEU:CD1	28	1.13	3.08



# 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 $(\circ)$
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	6	57.88
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	20	57.07
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	29	56.01
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	10	55.05
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	11	54.98
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	23	53.86
(1,110)	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	14	53.64
(1,110)	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	27	53.31
(1,110)	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	28	52.16
(1,110)	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	11	52.01



Key	$rac{a\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( o )
(1,110)	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	7	51.96
(1,110)	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	4	51.92
(1,110)	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	30	51.25
(1,110)	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	5	50.68
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	29	50.46
(1,110)	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	23	50.33
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	13	50.24
(1,110)	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	6	50.24
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	1	50.14
(1,110)	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	21	50.06
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	28	50.01
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	8	49.92
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	4	49.81
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	12	49.79
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	27	49.3
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	8	49.27
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	14	49.22
(1,110)	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	25	49.22
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	18	48.88
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	25	48.42
(1,110)	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	10	48.36
(1,110)	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	15	48.21
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	25	48.17
(1,110)	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	20	48.07
(1,110)	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	29	47.95
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	3	47.77
(1,110)	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	19	47.61
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	9	47.41
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	14	47.2
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	20	46.72
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	27	46.51
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	21	46.48
(1,110)	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	26	46.46
(1,107)	1:A:56:LEU:C	1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CA	1:A:57:PHE:C	28	46.33
(1,110)	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	8	46.27
(1,110)	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	13	46.26
(1,110)	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	3	46.19
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	12	46.16
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	15	45.98
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	17	45.78
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	17	45.75
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	30	45.52
(1,110)	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	16	45.33
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	19	45.22
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	16	45.18
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	3	45.15
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	6	45.11
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	7	45.1
(1,110)	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	12	44.81
(1,107)	1:A:56:LEU:C	1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CA	1:A:57:PHE:C	23	44.7
(1,110)	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	2	44.42



Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( o )
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	2	44.06
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	24	43.97
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	26	43.56
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	11	43.53
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1	43.45
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	22	43.32
(1,107)	1:A:56:LEU:C	1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CA	1:A:57:PHE:C	13	43.14
(1,107) $(1,107)$	1:A:56:LEU:C	1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CA	1:A:57:PHE:C	4	43.09
(1,110) $(1,110)$	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	17	42.96
(1,110) $(1,107)$	1:A:56:LEU:C	1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CA	1:A:57:PHE:C	14	42.93
(1,107) $(1,110)$	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	24	42.85
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	15	42.69
(1,107)	1:A:56:LEU:C	1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CA	1:A:57:PHE:C	6	42.67
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	24	42.64
(1,107)	1:A:56:LEU:C	1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CA	1:A:57:PHE:C	7	42.58
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	5	42.43
(1,14) $(1,110)$	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	1	42.38
(1,110) $(1,110)$	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	22	42.37
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	22	42.36
(1,14) $(1,110)$	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	9	42.08
(1,110) $(1,107)$	1:A:56:LEU:C	1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CA	1:A:57:PHE:C	19	41.89
(1,107) $(1,110)$	1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:CA	1:A:58:ASP:C	1:A:59:ASP:N	18	41.84
(1,110) $(1,162)$	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	13	41.7
(1,162) $(1,164)$	1:A:90:ASF:N 1:A:91:LYS:N	1:A:90:ASF:CA 1:A:91:LYS:CA	1:A:90:ASF:C 1:A:91:LYS:C	1:A:92:ASN:N	13	41.7
(1,164) $(1,164)$	1:A:91:LYS:N	1:A:91:L13:CA 1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	1:A:92:ASN:N 1:A:92:ASN:N	18	41.54
( ' /	1:A:91:LYS:N	1:A:91:L13:CA 1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	1:A:92:ASN:N 1:A:92:ASN:N	16	41.42
(1,164)	1:A:91:LYS:N				21	41.42
(1,164)	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA 1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C 1:A:91:LYS:C	1:A:92:ASN:N 1:A:92:ASN:N	12	41.20
(1,164)	1:A:56:LEU:C	1:A:91:LYS:CA 1:A:57:PHE:N	1:A:91:LYS:C 1:A:57:PHE:CA	1:A:92:A5N:N 1:A:57:PHE:C	25	
(1,107)	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	1:A:92:ASN:N	19	41.06
(1,164)	1:A:56:LEU:C	1:A:91:L15:CA 1:A:57:PHE:N	1:A:91:L15:C 1:A:57:PHE:CA	1:A:57:PHE:C	30	40.84 40.82
(1,107)	1:A:90:LEU:C 1:A:91:LYS:N			1:A:92:ASN:N		
(1,164)		1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C 1:A:57:PHE:CA		25 5	40.73
(1,107)	1:A:56:LEU:C	1:A:57:PHE:N 1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	1:A:57:PHE:C		40.62
(1,164)	1:A:91:LYS:N			1:A:92:ASN:N	23	40.55
(1,107)	1:A:56:LEU:C	1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CA	1:A:57:PHE:C	12	40.54
(1,164)	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	1:A:92:ASN:N	1	40.41
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	10	40.35
(1,107)	1:A:56:LEU:C	1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CA	1:A:57:PHE:C	26	40.27
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	4	40.21
(1,164)	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	1:A:92:ASN:N	6	40.16
(1,107)	1:A:56:LEU:C	1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CA	1:A:57:PHE:C	18	40.11
(1,164)	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	1:A:92:ASN:N	24	40.08
(1,107)	1:A:56:LEU:C	1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CA	1:A:57:PHE:C	27	39.98
(1,164)	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	1:A:92:ASN:N	15	39.83
(1,164)	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	1:A:92:ASN:N	29	39.81
(1,107)	1:A:56:LEU:C	1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CA	1:A:57:PHE:C	15	39.73
(1,164)	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	1:A:92:ASN:N	28	39.46
(1,107)	1:A:56:LEU:C	1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CA	1:A:57:PHE:C	2	39.41
(1,107)	1:A:56:LEU:C	1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CA	1:A:57:PHE:C	21	39.29
(1,107)	1:A:56:LEU:C	1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CA	1:A:57:PHE:C	20	39.24
(1,107)	1:A:56:LEU:C	1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CA	1:A:57:PHE:C	1	39.21



Key	$rac{d\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( o )
(1,107)	1:A:56:LEU:C	1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CA	1:A:57:PHE:C	8	38.89
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	2	38.66
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	5	38.57
(1,164)	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	1:A:92:ASN:N	30	38.5
(1,107)	1:A:56:LEU:C	1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CA	1:A:57:PHE:C	22	38.09
(1,107)	1:A:56:LEU:C	1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CA	1:A:57:PHE:C	11	38.04
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	13	38.03
(1,107)	1:A:56:LEU:C	1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CA	1:A:57:PHE:C	3	38.0
(1,107)	1:A:56:LEU:C	1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CA	1:A:57:PHE:C	9	37.88
(1,164)	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	1:A:92:ASN:N	11	37.82
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	30	37.53
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	18	37.45
(1,164)	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	1:A:92:ASN:N	17	37.4
(1,164)	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	1:A:92:ASN:N	9	37.21
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	20	37.16
(1,107)	1:A:56:LEU:C	1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CA	1:A:57:PHE:C	29	37.05
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	27	36.89
(1,161)	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	25	36.79
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	10	36.69
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	16	36.64
(1,74)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:ASP:N	21	36.52
(1,164)	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	1:A:92:ASN:N	7	36.48
(1,107)	1:A:56:LEU:C	1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CA	1:A:57:PHE:C	16	36.3
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	30	36.02
(1,164)	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	1:A:92:ASN:N	27	35.96
(1,107)	1:A:56:LEU:C	1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CA	1:A:57:PHE:C	10	35.87
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	18	35.82
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	9	35.72
(1,107)	1:A:56:LEU:C	1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CA	1:A:57:PHE:C	24	35.56
(1,164)	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	1:A:92:ASN:N	26	35.55
(1,164)	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	1:A:92:ASN:N	22	35.51
(1,164)	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	1:A:92:ASN:N	10	35.44
(1,161)	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	10	35.11
(1,164)	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	1:A:92:ASN:N	2	34.88
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	9	34.66
(1,107)	1:A:56:LEU:C	1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CA	1:A:57:PHE:C	17	34.66
(1,164)	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	1:A:92:ASN:N	4	34.59
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	30	34.5
(1,161)	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	26	34.23
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	26	34.2
(1,161)	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1	34.08
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	7	33.56
(1,161)	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	6	33.51
(1,164)	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	1:A:92:ASN:N	5	33.45
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	28	33.42
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	13	33.39
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	27	33.38
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	22	33.29
(1,164)	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	1:A:92:ASN:N	3	32.93
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	3	32.12
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	25	32.12



Key	$rac{ea\ from\ previous\ pag}{{f Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( o )
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	28	31.87
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	8	31.38
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	12	31.26
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	2	31.08
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	21	31.05
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	7	31.0
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	25	30.89
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1	30.66
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	4	30.16
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	21	29.95
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	15	29.9
(1,164)	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	1:A:92:ASN:N	20	29.88
(1,164)	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	1:A:92:ASN:N	8	29.77
(1,164)	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	1:A:92:ASN:N	14	29.75
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	2	29.7
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	24	29.69
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	23	29.69
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	23	29.69
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	16	29.32
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	6	29.18
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	19	29.06
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	17	28.83
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	4	28.55
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	17	28.31
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	14	28.25
(1,161)	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	27	28.25
(1,67)	1:A:35:TRP:C	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	26	28.05
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	5	27.56
(1,161)	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	8	27.55
(1,161)	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	16	27.48
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	10	27.32
(1,161)	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	9	27.22
(1,4)	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	1:A:5:VAL:N	10	26.79
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	5	26.28
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	29	26.24
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	16	25.89
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	28	25.66
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	24	25.1
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	15	25.02
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	8	24.9
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	18	24.84
(1,161)	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	2	24.75
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	7	24.71
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	3	24.49
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	11	24.49
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	19	24.4
(1,4)	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	1:A:5:VAL:N	23	24.26
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	22	23.99
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	12	23.38
(1,4)	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	1:A:5:VAL:N	28	23.27
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	23	22.98
(-,• -)					Continu	



Key	ed from previous pag  Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( o )
(1,4)	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	1:A:5:VAL:N	11	22.79
(1,73)	1:A:39:GLU:C	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	14	22.64
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	11	21.82
(1,161)	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	30	21.45
(1,4)	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	1:A:5:VAL:N	14	21.34
(1,4)	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	1:A:5:VAL:N	27	21.22
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	29	20.96
(1,4)	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	1:A:5:VAL:N	12	20.91
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	9	20.9
(1,4)	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	1:A:5:VAL:N	17	20.59
(1,4)	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	1:A:5:VAL:N	25	20.27
(1,10)	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:THR:N	9	19.96
(1,161)	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	19	19.85
(1,4)	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	1:A:5:VAL:N	3	19.81
(1,161)	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	29	19.77
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	26	19.71
(1,4)	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	1:A:5:VAL:N	15	19.54
(1,161)	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	24	19.46
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	19	18.55
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	20	18.04
(1,161)	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	13	18.0
(1,218)	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	1:A:122:LYS:N	9	17.76
(1,161)	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	7	17.42
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	1	17.38
(1,161)	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	28	16.9
(1,10)	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:THR:N	16	16.41
(1,10)	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:THR:N	6	15.53
(1,162)	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	6	15.47
(1,218)	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	1:A:122:LYS:N	26	14.82
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	8	14.81
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	17	14.34
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	21	14.3
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	7	14.24
(1,220)	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:CB	1:A:56:LEU:CG	1:A:56:LEU:CD1	24	14.24
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	14	14.17
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	24	14.17
(1,10)	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:THR:N	4	13.97
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	16	13.93
(1,220)	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:CB	1:A:56:LEU:CG	1:A:56:LEU:CD1	21	13.93
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	3	13.72
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	25	13.69
(1,4)	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	1:A:5:VAL:N	29	13.68
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	5	13.67
(1,218)	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	1:A:122:LYS:N	6	13.5
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	4	13.43
(1,10)	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:THR:N	28	13.35
(1,218)	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	1:A:122:LYS:N	11	13.27
(1,10)	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:THR:N	26	13.13
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	23	13.08
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	10	13.04
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	11 Continu	13.03



Key	Atom-1	<i>A</i> tom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( o )
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	15	12.98
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	19	12.94
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	1	12.93
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	20	12.92
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	22	12.9
(1,10)	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:THR:N	13	12.88
(1,220)	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:CB	1:A:56:LEU:CG	1:A:56:LEU:CD1	2	12.83
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	13	12.67
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	12	12.58
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	29	12.55
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	26	12.36
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	2	12.31
(1,220)	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:CB	1:A:56:LEU:CG	1:A:56:LEU:CD1	17	12.21
(1,10)	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:THR:N	20	12.16
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	18	12.09
(1,4)	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	1:A:5:VAL:N	21	11.97
(1,10)	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:THR:N	21	11.85
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	30	11.83
(1,4)	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	1:A:5:VAL:N	19	11.67
(1,220)	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:CB	1:A:56:LEU:CG	1:A:56:LEU:CD1	9	11.62
(1,220)	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:CB	1:A:56:LEU:CG	1:A:56:LEU:CD1	27	11.57
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	9	11.55
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	27	11.55
(1,220)	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:CB	1:A:56:LEU:CG	1:A:56:LEU:CD1	10	11.5
(1,220)	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:CB	1:A:56:LEU:CG	1:A:56:LEU:CD1	4	11.45
(1,4)	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	1:A:5:VAL:N	5	11.41
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	6	11.41
(1,220)	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:CB	1:A:56:LEU:CG	1:A:56:LEU:CD1	29	11.41
(1,220)	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:CB	1:A:56:LEU:CG	1:A:56:LEU:CD1	16	11.32
(1,218)	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	1:A:122:LYS:N	1	11.31
(1,220)	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:CB	1:A:56:LEU:CG	1:A:56:LEU:CD1	14	11.29
(1,220)	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:CB	1:A:56:LEU:CG	1:A:56:LEU:CD1	28	11.29
(1,4)	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	1:A:5:VAL:N	24	11.22
(1,10)	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:THR:N	8	11.13
(1,220)	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:CB	1:A:56:LEU:CG	1:A:56:LEU:CD1	19	11.09
(1,220)	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:CB	1:A:56:LEU:CG	1:A:56:LEU:CD1	26	11.05
(1,220)	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:CB	1:A:56:LEU:CG	1:A:56:LEU:CD1	15	11.04
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD2	29	10.97
(1,220)	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:CB	1:A:56:LEU:CG	1:A:56:LEU:CD1	5	10.78
(1,220)	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:CB	1:A:56:LEU:CG	1:A:56:LEU:CD1	8	10.78
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD2	6	10.78
(1,161)	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	3	10.78
(1,220)	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:CB	1:A:56:LEU:CG	1:A:56:LEU:CD1	25	10.76
(1,222)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	28	10.7
(1,220)	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:CB	1:A:56:LEU:CG	1:A:56:LEU:CD1	3	10.69
(1,220)	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:CB	1:A:56:LEU:CG	1:A:56:LEU:CD1	6	10.65
(1,218)	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	1:A:122:LYS:N	24	10.65
(1,10)	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:THR:N	30	10.62
(1,218)	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	1:A:122:LYS:N	14	10.61
(1,220)	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:CB	1:A:56:LEU:CG	1:A:56:LEU:CD1	22	10.58
(1,10)	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:THR:N	22	10.57



11,220	Key	$egin{array}{c} ed \ from \ previous \ pag \ \hline  oldsymbol{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( o )
(1.10)							, ,
(1,10)	· · /					25	
	( ' /						
	( ' /	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:CB	1:A:56:LEU:CG		20	
	· · /	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD2	27	10.26
	( ' /						
	· · /						
		1:A:113:LEU:CA	1:A:113:LEU:CB				
		1:A:56:LEU:CA					
(1,219)	· · /	1:A:56:LEU:CA					
(1,244	· · /						
(1,219)   1:A:11-LEU:CA	( ' /						
(1,10)	,						
(1,4)   1.A.34THR:N   1.A.34THR:CA   1.A.4THR:C   1.A.5:VAL:N   4   9.9	· · /						
(1,219	· · /					4	
(1,10)	, ,						
(1,224)   1:A:113:LEU:CA   1:A:113:LEU:CB   1:A:113:LEU:CG   1:A:113:LEU:CD   26   9.76   (1,10)   1:A:7:THR:N   1:A:7:THR:CA   1:A:7:THR:C   1:A:8:THR:N   29   9.75   (1,224)   1:A:113:LEU:CA   1:A:113:LEU:CB   1:A:113:LEU:CD   22   9.72   (1,161)   1:A:89:VAL:C   1:A:90:ASP:N   1:A:90:ASP:CA   1:A:90:ASP:C   11   9.67   (1,219)   1:A:11:LEU:CA   1:A:11:LEU:CB   1:A:11:LEU:CG   1:A:11:LEU:CD   19   9.62   (1,220)   1:A:56:LEU:CA   1:A:13:LEU:CB   1:A:13:LEU:CG   1:A:14:LEU:CD   10   9.47   (1,241)   1:A:113:LEU:CA   1:A:13:LEU:CB   1:A:13:LEU:CG   1:A:13:LEU:CD   10   9.47   (1,241)   1:A:113:LEU:CA   1:A:13:LEU:CB   1:A:113:LEU:CG   1:A:113:LEU:CD   10   9.47   (1,219)   1:A:113:LEU:CA   1:A:113:LEU:CB   1:A:113:LEU:CG   1:A:113:LEU:CD   28   9.45   (1,10)   1:A:7:THR:N   1:A:7:THR:C   1:A:7:THR:C   1:A:7:THR:N   15   9.44   (1,224)   1:A:113:LEU:CA   1:A:113:LEU:CB   1:A:113:LEU:CD   28   9.43   (1,220)   1:A:56:LEU:CA   1:A:56:LEU:CB   1:A:13:LEU:CD   10   9.47   (1,224)   1:A:113:LEU:CA   1:A:113:LEU:CB   1:A:113:LEU:CD   28   9.43   (1,220)   1:A:56:LEU:CA   1:A:56:LEU:CB   1:A:56:LEU:CD   1   1   9.43   (1,224)   1:A:113:LEU:CA   1:A:113:LEU:CB   1:A:113:LEU:CD   1   1   1   9.43   (1,224)   1:A:113:LEU:CA   1:A:113:LEU:CB   1:A:113:LEU:CD   2   9.37   (1,244)   1:A:113:LEU:CA   1:A:113:LEU:CB   1:A:113:LEU:CD   2   9.37   (1,244)   1:A:113:LEU:CA   1:A:113:LEU:CB   1:A:113:LEU:CD   1   9.2   (1,161)   1:A:89:VAL:C   1:A:90:ASP:N   1:A:90:ASP:C   1:A:113:LEU:CD   1   9.2   (1,161)   1:A:56:LEU:CA   1:A:56:LEU:CB   1:A:113:LEU:CB   1:A:113:LEU:CD   1   9.2   (1,161)   1:A:56:LEU:CA   1:A:56:LEU:CB   1:A:56:LEU:CB   1:A:56:LEU:CD   1   9.2   (1,161)   1:A:56:LEU:CA   1:A:56:LEU:CB   1:A:13:LEU:CB   1:A:13:LEU:CB   1   9.15   (1,244)   1:A:113:LEU:CA   1:A:13:LEU:CB   1:A:113:LEU:CB   1:A:13:LEU:CB   1   9.15   (1,244)   1:A:13:LEU:CA   1:A:13:LEU:CB   1:A:13:LEU:CB   1:A:13:LEU:CD   1   9.1   (1,224)   1:A:13:LEU:CA   1:A:13:LEU:CB   1:A:13:LEU:CB   1:A:13:LEU:CD   1   9.1   (1,224)   1:A:13:LEU:CA   1:A	· · /						
(1,10) 1:A:7:THR:N 1:A:7:THR:CA 1:A:7:THR:C 1:A:8:THR:N 29 9.75 (1,224) 1:A:113:LEU:CB 1:A:113:LEU:CB 1:A:113:LEU:CB 29 9.72 (1,161) 1:A:89:VAL:C 1:A:90:ASP:N 1:A:90:ASP:CA 1:A:90:ASP:C 11 9.67 (1,219) 1:A:11:LEU:CA 1:A:11:LEU:CB 1:A:11:LEU:CG 1:A:11:LEU:CD2 19 9.62 (1,220) 1:A:56:LEU:CA 1:A:56:LEU:CB 1:A:56:LEU:CG 1:A:56:LEU:CD1 13 9.52 (1,224) 1:A:11:LEU:CA 1:A:11:LEU:CB 1:A:56:LEU:CG 1:A:56:LEU:CD1 13 9.52 (1,224) 1:A:11:LEU:CA 1:A:11:LEU:CB 1:A:11:LEU:CG 1:A:11:LEU:CD2 10 9.47 (1,219) 1:A:11:LEU:CA 1:A:11:LEU:CB 1:A:11:LEU:CG 1:A:11:LEU:CD2 8 9.45 (1,10) 1:A:7:THR:N 1:A:7:THR:CA 1:A:7:THR:C 1:A:13:LEU:CD2 8 9.45 (1,10) 1:A:7:THR:N 1:A:7:THR:CA 1:A:7:THR:C 1:A:56:LEU:CD 28 9.43 (1,220) 1:A:56:LEU:CA 1:A:113:LEU:CB 1:A:113:LEU:CG 1:A:113:LEU:CD2 28 9.43 (1,220) 1:A:56:LEU:CA 1:A:56:LEU:CB 1:A:56:LEU:CG 1:A:56:LEU:CD1 11 9.43 (1,224) 1:A:113:LEU:CA 1:A:113:LEU:CB 1:A:113:LEU:CG 1:A:113:LEU:CD2 2 9.37 (1,218) 1:A:12:LIYS:N 1:A:12:LIYS:CA 1:A:113:LEU:CB 1:A:113:LEU:CD2 2 9.37 (1,224) 1:A:113:LEU:CA 1:A:113:LEU:CB 1:A:113:LEU:CG 1:A:113:LEU:CD2 2 9.37 (1,224) 1:A:113:LEU:CA 1:A:13:LEU:CB 1:A:113:LEU:CG 1:A:113:LEU:CD2 2 9.37 (1,224) 1:A:113:LEU:CA 1:A:13:LEU:CB 1:A:113:LEU:CG 1:A:113:LEU:CD2 1 9.2 (1,61) 1:A:89:VAL:C 1:A:90:ASP:N 1:A:90:ASP:C 14 9.15 (1,44) 1:A:4:THR:N 1:A:4:THR:CA 1:A:4:THR:C 1:A:56:LEU:CD 1 9.2 (1,61) 1:A:89:VAL:C 1:A:90:ASP:N 1:A:90:ASP:C 14 9.15 (1,44) 1:A:4:THR:N 1:A:4:THR:CA 1:A:4:THR:C 1:A:56:LEU:CD 1 0.9 1.3 (1,224) 1:A:113:LEU:CA 1:A:113:LEU:CB 1:A:113:LEU:CG 1:A:113:LEU:CD 2 5 9.0 (1,224) 1:A:113:LEU:CA 1:A:113:LEU:CB 1:A:113:LEU:CG 1:A:113:LEU:CD 2 5 9.0 (1,224) 1:A:113:LEU:CA 1:A:113:LEU:CB 1:A:113:LEU	/						
(1,224)	· · /						
(1,161)	( ' /						
(1,219  1:A:11:LEU:CA	· · /						
(1,220	· · /						
(1,224	/						
(1,219)         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:CB         1:A:11:LEU:CG         1:A:11:LEU:CD2         8         9.45           (1,10)         1:A:7:THR:N         1:A:7:THR:CA         1:A:7:THR:C         1:A:8:THR:N         15         9.44           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CD         1:A:113:LEU:CD         28         9.43           (1,220)         1:A:6:LEU:CA         1:A:56:LEU:CB         1:A:6:LEU:CD         1:A:6:LEU:CD1         11         9.43           (1,219)         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:CB         1:A:11:LEU:CG         1:A:6:LEU:CD1         11         9.43           (1,219)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:6:LEU:CD2         2.9.37           (1,218)         1:A:121:LYS:N         1:A:121:LYS:CA         1:A:13:LEU:CG         1:A:13:LEU:CD2         2         9.37           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:13:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         2         9.37           (1,224)         1:A:13:LEU:CA         1:A:13:LEU:CG         1:A:13:LEU:CD2         1         9.2           (1,14)         1:A:4:THR:N         1:A:4:THR:CA         1:A:4:THR:C         1:A:56:LEU:CD1         30         9.13           (1,24) <td>· · /</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>	· · /						
(1,10)         1:A:7:THR:N         1:A:7:THR:CA         1:A:7:THR:C         1:A:8:THR:N         15         9.44           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:13:LEU:CD2         28         9.43           (1,220)         1:A:56:LEU:CA         1:A:56:LEU:CB         1:A:56:LEU:CG         1:A:66:LEU:CD1         11         9.43           (1,219)         1:A:11:LEU:CA         1:A:111:LEU:CB         1:A:111:LEU:CG         1:A:111:LEU:CD2         2         9.37           (1,218)         1:A:121:LYS:N         1:A:121:LYS:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         2         9.37           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         1         9.2           (1,161)         1:A:89:VAL:C         1:A:90:ASP:N         1:A:90:ASP:CA         1:A:50:ASP:C         14         9.15           (1,4)         1:A:4:THR:N         1:A:4:THR:CA         1:A:4:THR:C         1:A:56:LEU:CD1         30         9.13           (1,220)         1:A:56:LEU:CA         1:A:4:THR:CA         1:A:4:THR:C         1:A:56:LEU:CD1         30         9.13           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CD <td>· · /</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>	· · /						
(1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         28         9.43           (1,220)         1:A:56:LEU:CA         1:A:56:LEU:CB         1:A:56:LEU:CG         1:A:56:LEU:CD1         11         9.43           (1,219)         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:CB         1:A:12:LYS:CA         1:A:12:LYS:CA         1:A:12:LYS:CD         2         9.37           (1,218)         1:A:12:LYS:N         1:A:12:LYS:CA         1:A:12:LYS:C         1:A:12:LYS:N         28         9.27           (1,224)         1:A:13:LEU:CA         1:A:13:LEU:CB         1:A:13:LEU:CD         1         9.2           (1,161)         1:A:89:VAL:C         1:A:90:ASP:N         1:A:90:ASP:CA         1:A:4:THR:N         26         9.14           (1,220)         1:A:56:LEU:CA         1:A:56:LEU:CB         1:A:56:LEU:CB         1:A:56:LEU:CD         30         9.13           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:13:LEU:CB         1:A:13:LEU:CD         20         9.13           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CD         14         9.1           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CD         15         9.0           (1,224)	· · /						
(1,220)         1:A:56:LEU:CA         1:A:56:LEU:CB         1:A:56:LEU:CG         1:A:56:LEU:CD1         11         9.43           (1,219)         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:CB         1:A:11:LEU:CG         1:A:11:LEU:CD2         2         9.37           (1,218)         1:A:121:LYS:N         1:A:121:LYS:CA         1:A:121:LYS:C         1:A:13:LEU:CD2         2         9.37           (1,224)         1:A:13:LEU:CA         1:A:13:LEU:CB         1:A:13:LEU:CG         1:A:13:LEU:CD2         1         9.2           (1,161)         1:A:89:VAL:C         1:A:90:ASP:N         1:A:90:ASP:CA         1:A:490:ASP:C         14         9.15           (1,4)         1:A:4:THR:N         1:A:4:THR:CA         1:A:4:THR:C         1:A:5:VAL:N         26         9.14           (1,220)         1:A:5:SELU:CA         1:A:13:LEU:CB         1:A:4:THR:C         1:A:4:5:VAL:N         26         9.13           (1,161)         1:A:3:SEU:CA         1:A:4:13:LEU:CB         1:A:13:LEU:CG         1:A:13:LEU:CD1         30         9.13           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         17         9.1           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2 <td> /</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>	/						
(1,219)         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:CB         1:A:11:LEU:CG         1:A:11:LEU:CD2         2         9.37           (1,218)         1:A:121:LYS:N         1:A:121:LYS:CA         1:A:121:LYS:C         1:A:122:LYS:N         28         9.27           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         1         9.2           (1,461)         1:A:89:VAL:C         1:A:90:ASP:N         1:A:90:ASP:CA         1:A:90:ASP:C         14         9.15           (1,4)         1:A:4:THR:N         1:A:4:THR:CA         1:A:4:THR:C         1:A:50:ALEU:CD         26         9.14           (1,220)         1:A:56:LEU:CA         1:A:56:LEU:CB         1:A:56:LEU:CD         30         9.13           (1,61)         1:A:89:VAL:C         1:A:90:ASP:N         1:A:90:ASP:CA         1:A:90:ASP:C         20         9.13           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         14         9.1           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         17         9.1           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         5	· · /						
(1,218)         1:A:121:LYS:N         1:A:121:LYS:CA         1:A:121:LYS:C         1:A:122:LYS:N         28         9.27           (1,224)         1:A:13:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         1         9.2           (1,161)         1:A:89:VAL:C         1:A:90:ASP:N         1:A:90:ASP:CA         1:A:90:ASP:C         14         9.15           (1,4)         1:A:4:THR:N         1:A:4:THR:CA         1:A:4:THR:C         1:A:5:VAL:N         26         9.14           (1,220)         1:A:56:LEU:CA         1:A:56:LEU:CB         1:A:56:LEU:CG         1:A:56:LEU:CD1         30         9.13           (1,161)         1:A:89:VAL:C         1:A:90:ASP:N         1:A:90:ASP:CA         20         9.13           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         14         9.1           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         17         9.1           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         5         9.03           (1,219)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         18	· · /						
(1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         1         9.2           (1,161)         1:A:89:VAL:C         1:A:90:ASP:N         1:A:90:ASP:CA         1:A:90:ASP:C         14         9.15           (1,4)         1:A:4:THR:N         1:A:4:THR:CA         1:A:4:THR:C         1:A:55:VAL:N         26         9.14           (1,220)         1:A:56:LEU:CA         1:A:56:LEU:CB         1:A:66:LEU:CG         1:A:56:LEU:CD1         30         9.13           (1,161)         1:A:89:VAL:C         1:A:90:ASP:N         1:A:90:ASP:CA         1:A:90:ASP:C         20         9.13           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         14         9.1           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         17         9.1           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         5         9.03           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         25         9.0           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:11	,					28	
(1,161)         1:A:89:VAL:C         1:A:90:ASP:N         1:A:90:ASP:CA         1:A:90:ASP:C         14         9.15           (1,4)         1:A:4:THR:N         1:A:4:THR:CA         1:A:4:THR:C         1:A:5:VAL:N         26         9.14           (1,220)         1:A:56:LEU:CA         1:A:56:LEU:CB         1:A:56:LEU:CG         1:A:56:LEU:CD1         30         9.13           (1,161)         1:A:89:VAL:C         1:A:90:ASP:N         1:A:90:ASP:CA         1:A:90:ASP:C         20         9.13           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         14         9.1           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         17         9.1           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         5         9.03           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         5         9.03           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         1         9.0           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113	,						
(1,4)         1:A:4:THR:N         1:A:4:THR:CA         1:A:4:THR:C         1:A:5:VAL:N         26         9.14           (1,220)         1:A:56:LEU:CA         1:A:56:LEU:CB         1:A:56:LEU:CG         1:A:56:LEU:CD1         30         9.13           (1,161)         1:A:89:VAL:C         1:A:90:ASP:N         1:A:90:ASP:CA         1:A:90:ASP:C         20         9.13           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         14         9.1           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         17         9.1           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         5         9.03           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         25         9.0           (1,219)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         18         9.0           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         18         9.0           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG <th< td=""><td>` ' /</td><td>1:A:89:VAL:C</td><td>1:A:90:ASP:N</td><td></td><td>1:A:90:ASP:C</td><td>14</td><td>9.15</td></th<>	` ' /	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N		1:A:90:ASP:C	14	9.15
(1,220)         1:A:56:LEU:CA         1:A:56:LEU:CB         1:A:56:LEU:CG         1:A:56:LEU:CD1         30         9.13           (1,161)         1:A:89:VAL:C         1:A:90:ASP:N         1:A:90:ASP:CA         1:A:90:ASP:C         20         9.13           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         14         9.1           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         17         9.1           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         5         9.03           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         25         9.0           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         18         9.0           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         19         8.92           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         7         8.91           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG <td>· · /</td> <td></td> <td>1:A:4:THR:CA</td> <td></td> <td></td> <td>26</td> <td></td>	· · /		1:A:4:THR:CA			26	
(1,161)         1:A:89:VAL:C         1:A:90:ASP:N         1:A:90:ASP:CA         1:A:90:ASP:C         20         9.13           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         14         9.1           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         17         9.1           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         5         9.03           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         25         9.0           (1,219)         1:A:113:LEU:CA         1:A:111:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         18         9.0           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CD2         19         8.92           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CD2         7         8.91           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CD2         13         8.89           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CD2         2         8.68           (1,224)	, ,	1:A:56:LEU:CA		1:A:56:LEU:CG	1:A:56:LEU:CD1	30	
(1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         14         9.1           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         17         9.1           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         5         9.03           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         25         9.0           (1,219)         1:A:111:LEU:CA         1:A:111:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         18         9.0           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         19         8.92           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         7         8.91           (1,219)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         13         8.89           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         24         8.68           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:1	\ ' ' /	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	20	9.13
(1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         17         9.1           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         5         9.03           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         25         9.0           (1,219)         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         18         9.0           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CD2         19         8.92           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         7         8.91           (1,219)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         13         8.89           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         24         8.68           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CD         23         8.66           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CD         24         8.68							
(1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         5         9.03           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         25         9.0           (1,219)         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:CB         1:A:11:LEU:CG         1:A:11:LEU:CD2         18         9.0           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         19         8.92           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         7         8.91           (1,219)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         13         8.89           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         6         8.75           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         24         8.68           (1,219)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         23         8.66           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:			1:A:113:LEU:CB	1:A:113:LEU:CG	1:A:113:LEU:CD2	17	9.1
(1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         25         9.0           (1,219)         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:CB         1:A:11:LEU:CG         1:A:11:LEU:CD2         18         9.0           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         19         8.92           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         7         8.91           (1,219)         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:CB         1:A:11:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         13         8.89           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         6         8.75           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         24         8.68           (1,219)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         23         8.66           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         2         8.62           (1,4)         1:A:4:THR:N         1:A:4:THR:CA         1:A:4:THR:C							
(1,219)         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:CB         1:A:11:LEU:CG         1:A:11:LEU:CD2         18         9.0           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         19         8.92           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         7         8.91           (1,219)         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         13         8.89           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         6         8.75           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         24         8.68           (1,219)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         23         8.66           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         2         8.62           (1,4)         1:A:4:THR:N         1:A:4:THR:CA         1:A:4:THR:C         1:A:5:VAL:N         22         8.58           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CB	· · /						
(1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         19         8.92           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         7         8.91           (1,219)         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:CB         1:A:11:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         13         8.89           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         6         8.75           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         24         8.68           (1,219)         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:CB         1:A:11:LEU:CG         1:A:11:LEU:CD2         23         8.66           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         2         8.62           (1,4)         1:A:4:THR:N         1:A:4:THR:CA         1:A:4:THR:C         1:A:5:VAL:N         22         8.58           (1,4)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CD2         11         8.56           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CD2							
(1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         7         8.91           (1,219)         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:CB         1:A:11:LEU:CG         1:A:11:LEU:CD2         13         8.89           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         6         8.75           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         24         8.68           (1,219)         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:CB         1:A:11:LEU:CG         1:A:11:LEU:CD2         23         8.66           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         2         8.62           (1,4)         1:A:4:THR:N         1:A:4:THR:CA         1:A:4:THR:C         1:A:5:VAL:N         22         8.58           (1,4)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CD         1:A:5:VAL:N         18         8.56           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CD         1:A:113:LEU:CD2         11         8.56							
(1,219)         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:CB         1:A:11:LEU:CG         1:A:11:LEU:CD2         13         8.89           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         6         8.75           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         24         8.68           (1,219)         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:CB         1:A:11:LEU:CG         1:A:11:LEU:CD2         23         8.66           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         2         8.62           (1,4)         1:A:4:THR:N         1:A:4:THR:CA         1:A:4:THR:C         1:A:5:VAL:N         22         8.58           (1,4)         1:A:4:THR:N         1:A:4:THR:CA         1:A:4:THR:C         1:A:5:VAL:N         18         8.56           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CD         11         8.56							
(1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         6         8.75           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         24         8.68           (1,219)         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:CB         1:A:11:LEU:CG         1:A:11:LEU:CD2         23         8.66           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         2         8.62           (1,4)         1:A:4:THR:N         1:A:4:THR:CA         1:A:4:THR:C         1:A:5:VAL:N         22         8.58           (1,4)         1:A:4:THR:N         1:A:4:THR:CA         1:A:4:THR:C         1:A:5:VAL:N         18         8.56           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CD         11         8.56							
(1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         24         8.68           (1,219)         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:CB         1:A:11:LEU:CG         1:A:11:LEU:CD2         23         8.66           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         2         8.62           (1,4)         1:A:4:THR:N         1:A:4:THR:CA         1:A:4:THR:C         1:A:5:VAL:N         22         8.58           (1,4)         1:A:4:THR:N         1:A:4:THR:CA         1:A:4:THR:C         1:A:5:VAL:N         18         8.56           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CD2         11         8.56							
(1,219)         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:CB         1:A:11:LEU:CG         1:A:11:LEU:CD2         23         8.66           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         2         8.62           (1,4)         1:A:4:THR:N         1:A:4:THR:CA         1:A:4:THR:C         1:A:5:VAL:N         22         8.58           (1,4)         1:A:4:THR:N         1:A:4:THR:CA         1:A:4:THR:C         1:A:5:VAL:N         18         8.56           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CD2         11         8.56							
(1,224)     1:A:113:LEU:CA     1:A:113:LEU:CB     1:A:113:LEU:CG     1:A:113:LEU:CD2     2     8.62       (1,4)     1:A:4:THR:N     1:A:4:THR:CA     1:A:4:THR:C     1:A:5:VAL:N     22     8.58       (1,4)     1:A:4:THR:N     1:A:4:THR:CA     1:A:4:THR:C     1:A:5:VAL:N     18     8.56       (1,224)     1:A:113:LEU:CA     1:A:113:LEU:CG     1:A:113:LEU:CD2     11     8.56							
(1,4)         1:A:4:THR:N         1:A:4:THR:CA         1:A:4:THR:C         1:A:5:VAL:N         22         8.58           (1,4)         1:A:4:THR:N         1:A:4:THR:CA         1:A:4:THR:C         1:A:5:VAL:N         18         8.56           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         11         8.56	· · /						
(1,4)         1:A:4:THR:N         1:A:4:THR:CA         1:A:4:THR:C         1:A:5:VAL:N         18         8.56           (1,224)         1:A:113:LEU:CA         1:A:113:LEU:CB         1:A:113:LEU:CG         1:A:113:LEU:CD2         11         8.56	· · /					22	
(1,224) 1:A:113:LEU:CA 1:A:113:LEU:CB 1:A:113:LEU:CG 1:A:113:LEU:CD2 11 8.56	` '						
	. ,						
$\lfloor (1,219) \rfloor$ TATITLEU:UA   TATITLEU:UD   TATITLEU:UG   TATITLEU:UD2   17   8.54	(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD2	17	8.54



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( $\circ$ )
(1,224)	1:A:113:LEU:CA	1:A:113:LEU:CB	1:A:113:LEU:CG	1:A:113:LEU:CD2	16	8.51
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD2	11	8.44
(1,4)	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	1:A:5:VAL:N	8	8.41
(1,224)	1:A:113:LEU:CA	1:A:113:LEU:CB	1:A:113:LEU:CG	1:A:113:LEU:CD2	9	8.38
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD2	4	8.3
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD2	24	8.26
(1,224)	1:A:113:LEU:CA	1:A:113:LEU:CB	1:A:113:LEU:CG	1:A:113:LEU:CD2	21	8.25
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD2	30	8.23
(1,224)	1:A:113:LEU:CA	1:A:113:LEU:CB	1:A:113:LEU:CG	1:A:113:LEU:CD2	15	8.2
(1,10)	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:THR:N	11	8.19
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD2	20	8.13
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD2	25	8.05
(1,4)	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	1:A:5:VAL:N	6	8.0
(1,224)	1:A:113:LEU:CA	1:A:113:LEU:CB	1:A:113:LEU:CG	1:A:113:LEU:CD2	4	7.92
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD2	5	7.91
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD2	16	7.91
(1,224)	1:A:113:LEU:CA	1:A:113:LEU:CB	1:A:113:LEU:CG	1:A:113:LEU:CD2	20	7.9
(1,224)	1:A:113:LEU:CA	1:A:113:LEU:CB	1:A:113:LEU:CG	1:A:113:LEU:CD2	27	7.88
(1,224)	1:A:113:LEU:CA	1:A:113:LEU:CB	1:A:113:LEU:CG	1:A:113:LEU:CD2	18	7.87
(1,224)	1:A:113:LEU:CA	1:A:113:LEU:CB	1:A:113:LEU:CG	1:A:113:LEU:CD2	30	7.86
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD2	22	7.86
(1,224)	1:A:113:LEU:CA	1:A:113:LEU:CB	1:A:113:LEU:CG	1:A:113:LEU:CD2	29	7.83
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD2	14	7.83
(1,219) $(1,219)$	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD2	1	7.63
(1,213) $(1,10)$	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:THR:N	2	7.62
(1,10) $(1,219)$	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD2	3	7.51
(1,219) $(1,218)$	1:A:11:LEU:CA 1:A:121:LYS:N	1:A:11:LEU:CB 1:A:121:LYS:CA	1:A:11:LEU:CG 1:A:121:LYS:C	1:A:11:LEU:CD2 1:A:122:LYS:N	3	7.5
/	1:A:121:L15:N 1:A:113:LEU:CA	1:A:121:L15:CA 1:A:113:LEU:CB	1:A:121:L15:C 1:A:113:LEU:CG	1:A:122:L15:N 1:A:113:LEU:CD2	12	
(1,224)						7.44
(1,10)	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:THR:N	18 21	7.42
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD2		7.28
(1,224)	1:A:113:LEU:CA	1:A:113:LEU:CB	1:A:113:LEU:CG	1:A:113:LEU:CD2	3	7.2
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD2	7	6.99
(1,161)	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	18	6.5
(1,10)	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:THR:N	3	6.5
			l .	1:A:113:LEU:CD2	8	6.49
(1,10)	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:THR:N	5	6.44
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD2	9	6.35
(1,4)	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	1:A:5:VAL:N	9	6.24
(1,218)	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	1:A:122:LYS:N	18	6.18
(1,68)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:PHE:N	15	6.02
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD2	10	5.94
(1,219)	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:CB	1:A:11:LEU:CG	1:A:11:LEU:CD2	28	5.58
(1,218)	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	1:A:122:LYS:N	16	5.29
(1,68)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:PHE:N	24	5.16
(1,10)	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:THR:N	19	4.72
(1,4)	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	1:A:5:VAL:N	7	4.5
(1,68)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:PHE:N	14	4.22
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	24	4.21
(1,10)	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:THR:N	24	4.16
(1,68)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:PHE:N	8	4.08
(1,68)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:PHE:N	21	4.08
	1		1	1	Continu	ed on next page



Key	$rac{\textbf{ea from previous pag}}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( o )
(1,4)	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	1:A:5:VAL:N	20	3.99
(1,161)	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	23	3.72
(1,218)	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	1:A:122:LYS:N	25	3.68
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	25	3.46
(1,10)	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:THR:N	7	3.37
(1,218)	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	1:A:122:LYS:N	23	3.23
(1,4)	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	1:A:5:VAL:N	13	3.22
(1,68)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:PHE:N	12	3.15
(1,68)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:PHE:N	30	3.15
(1,10)	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:THR:N	12	3.1
(1,223)	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:CB	1:A:86:LEU:CG	1:A:86:LEU:CD1	8	3.08
(1,218)	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	1:A:122:LYS:N	20	3.05
(1,68)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:PHE:N	23	2.95
(1,223)	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:CB	1:A:86:LEU:CG	1:A:86:LEU:CD1	11	2.93
(1,68)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:PHE:N	28	2.89
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	11	2.88
(1,10)	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:THR:N	23	2.83
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	7	2.82
(1,4)	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	1:A:5:VAL:N	1	2.75
(1,10)	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:THR:N	17	2.71
(1,223)	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:CB	1:A:86:LEU:CG	1:A:86:LEU:CD1	3	2.69
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	3	2.55
(1,223)	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:CB	1:A:86:LEU:CG	1:A:86:LEU:CD1	29	2.54
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	30	2.48
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	15	2.34
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	10	2.28
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	12	2.28
(1,223)	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:CB	1:A:86:LEU:CG	1:A:86:LEU:CD1	28	2.24
(1,161)	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	17	2.21
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	26	2.19
(1,218)	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	1:A:122:LYS:N	27	2.18
(1,157)	1:A:87:LYS:C	1:A:88:CYS:N	1:A:88:CYS:CA	1:A:88:CYS:C	20	2.15
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	5	2.11
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	8	2.1
(1,169)	1:A:94:ASP:C	1:A:95:ASN:N	1:A:95:ASN:CA	1:A:95:ASN:C	7	2.09
(1,2)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	1:A:4:THR:N	16	2.08
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	29	2.05
(1,218)	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	1:A:122:LYS:N	15	1.97
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	28	1.96
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	13	1.85
(1,161)	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	22	1.81
(1,223)	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:CB	1:A:86:LEU:CG	1:A:86:LEU:CD1	2	1.79
(1,169)	1:A:94:ASP:C	1:A:95:ASN:N	1:A:95:ASN:CA	1:A:95:ASN:C	13	1.76
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	17	1.69
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	27	1.68
(1,223)	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:CB	1:A:86:LEU:CG	1:A:86:LEU:CD1	30	1.67
(1,223)	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:CB	1:A:86:LEU:CG	1:A:86:LEU:CD1	16	1.61
(1,218)	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	1:A:122:LYS:N	22	1.61
(1,218)	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	1:A:122:LYS:N	30	1.6
(1,68)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:PHE:N	2	1.53
(1,94)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:PHE:N	18	1.48



Key	$egin{array}{c} egin{array}{c} \egin{array}{c} \egin{array}{c} \egin{array}{c} \egin{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( o )
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	1	1.48
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	19	1.48
(1,218)	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	1:A:122:LYS:N	10	1.46
(1,217)	1:A:120:ILE:C	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	23	1.46
(1,163)	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	5	1.44
(1,223)	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:CB	1:A:86:LEU:CG	1:A:86:LEU:CD1	19	1.42
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	4	1.35
(1,169)	1:A:94:ASP:C	1:A:95:ASN:N	1:A:95:ASN:CA	1:A:95:ASN:C	14	1.34
(1,223)	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:CB	1:A:86:LEU:CG	1:A:86:LEU:CD1	24	1.3
(1,135)	1:A:74:HIS:C	1:A:75:GLY:N	1:A:75:GLY:CA	1:A:75:GLY:C	17	1.3
(1,217)	1:A:120:ILE:C	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	14	1.27
(1,4)	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	1:A:5:VAL:N	2	1.26
(1,223)	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:CB	1:A:86:LEU:CG	1:A:86:LEU:CD1	10	1.26
(1,163)	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	18	1.26
(1,68)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:PHE:N	5	1.22
(1,223)	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:CB	1:A:86:LEU:CG	1:A:86:LEU:CD1	14	1.22
(1,217)	1:A:120:ILE:C	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	24	1.22
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	22	1.22
(1,3)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	18	1.2
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	14	1.2
(1,223)	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:CB	1:A:86:LEU:CG	1:A:86:LEU:CD1	17	1.16
(1,129)	1:A:70:HIS:C	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	12	1.16
(1,168)	1:A:94:ASP:N	1:A:94:ASP:CA	1:A:94:ASP:C	1:A:95:ASN:N	22	1.15
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	21	1.14
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	18	1.12
(1,217)	1:A:120:ILE:C	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	9	1.1
(1,217)	1:A:120:ILE:C	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	17	1.1
(1,169)	1:A:94:ASP:C	1:A:95:ASN:N	1:A:95:ASN:CA	1:A:95:ASN:C	25	1.09
(1,217)	1:A:120:ILE:C	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	18	1.08
(1,169)	1:A:94:ASP:C	1:A:95:ASN:N	1:A:95:ASN:CA	1:A:95:ASN:C	1	1.08
(1,223)	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:CB	1:A:86:LEU:CG	1:A:86:LEU:CD1	23	1.05
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	2	1.02
(1,68)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:PHE:N	3	1.01
(1,3)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	2	1.01
(1,169)	1:A:94:ASP:C	1:A:95:ASN:N	1:A:95:ASN:CA	1:A:95:ASN:C	16	1.01
(1,217)	1:A:120:ILE:C	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	5	1.0
(1,169)	1:A:94:ASP:C	1:A:95:ASN:N	1:A:95:ASN:CA	1:A:95:ASN:C	22	1.0
(1,223)	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:CB	1:A:86:LEU:CG	1:A:86:LEU:CD1	6	0.99
(1,223)	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:CB	1:A:86:LEU:CG	1:A:86:LEU:CD1	22	0.99
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	9	0.99
(1,163)	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	14	0.98
(1,169)	1:A:94:ASP:C	1:A:95:ASN:N	1:A:95:ASN:CA	1:A:95:ASN:C	5	0.97
(1,135)	1:A:74:HIS:C	1:A:75:GLY:N	1:A:75:GLY:CA	1:A:75:GLY:C	28	0.97
(1,170)	1:A:95:ASN:N	1:A:95:ASN:CA	1:A:95:ASN:C	1:A:96:ASN:N	2	0.95
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	16	0.95
(1,129)	1:A:70:HIS:C	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	14	0.94
(1,135)	1:A:74:HIS:C	1:A:75:GLY:N	1:A:75:GLY:CA	1:A:75:GLY:C	23	0.93
(1,130)	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	1:A:72:LEU:N	24	0.92
(1,3)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	30	0.89
(1,130)	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	1:A:72:LEU:N	25	0.88
(1,135)	1:A:74:HIS:C	1:A:75:GLY:N	1:A:75:GLY:CA	1:A:75:GLY:C	6	0.86



Key	$rac{d\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ\ )$
(1,169)	1:A:94:ASP:C	1:A:95:ASN:N	1:A:95:ASN:CA	1:A:95:ASN:C	8	0.85
(1,129)	1:A:70:HIS:C	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	7	0.85
(1,3)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	19	0.83
(1,130)	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	1:A:72:LEU:N	10	0.82
(1,223)	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:CB	1:A:86:LEU:CG	1:A:86:LEU:CD1	5	0.8
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	20	0.8
(1,130)	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	1:A:72:LEU:N	28	0.79
(1,68)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:PHE:N	22	0.78
(1,3)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	29	0.78
(1,3)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	27	0.77
(1,217)	1:A:120:ILE:C	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	15	0.76
(1,37)	1:A:20:SER:C	1:A:21:SER:N	1:A:21:SER:CA	1:A:21:SER:C	18	0.75
(1,135)	1:A:74:HIS:C	1:A:75:GLY:N	1:A:75:GLY:CA	1:A:75:GLY:C	4	0.72
(1,135)	1:A:74:HIS:C	1:A:75:GLY:N	1:A:75:GLY:CA	1:A:75:GLY:C	9	0.71
(1,130)	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	1:A:72:LEU:N	12	0.71
(1,160)	1:A:89:VAL:N	1:A:89:VAL:CA	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	20	0.69
(1,163)	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	11	0.68
(1,129)	1:A:70:HIS:C	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	11	0.66
(1,135)	1:A:74:HIS:C	1:A:75:GLY:N	1:A:75:GLY:CA	1:A:75:GLY:C	1	0.64
(1,130)	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	1:A:72:LEU:N	3	0.64
(1,217)	1:A:120:ILE:C	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	16	0.63
(1,3)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	13	0.62
(1,3)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	4	0.6
(1,129)	1:A:70:HIS:C	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	10	0.6
(1,218)	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	1:A:122:LYS:N	2	0.58
(1,3)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	26	0.57
(1,217)	1:A:120:ILE:C	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	21	0.57
(1,170)	1:A:95:ASN:N	1:A:95:ASN:CA	1:A:95:ASN:C	1:A:96:ASN:N	1	0.57
(1,135)	1:A:74:HIS:C	1:A:75:GLY:N	1:A:75:GLY:CA	1:A:75:GLY:C	18	0.56
(1,217)	1:A:120:ILE:C	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	27	0.55
(1,217)	1:A:120:ILE:C	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	8	0.54
(1,169)	1:A:94:ASP:C	1:A:95:ASN:N	1:A:95:ASN:CA	1:A:95:ASN:C	30	0.54
(1,68)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:PHE:N	18	0.51
(1,218)	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	1:A:122:LYS:N	19	0.5
(1,129)	1:A:70:HIS:C	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	29	0.49
(1,129)	1:A:70:HIS:C	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	19	0.48
(1,223)	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:CB	1:A:86:LEU:CG	1:A:86:LEU:CD1	13	0.47
(1,160)	1:A:89:VAL:N	1:A:89:VAL:CA	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	5	0.47
(1,170)	1:A:95:ASN:N	1:A:95:ASN:CA	1:A:95:ASN:C	1:A:96:ASN:N	23	0.46
(1,130)	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	1:A:72:LEU:N	19	0.44
(1,223)	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:CB	1:A:86:LEU:CG	1:A:86:LEU:CD1	1	0.43
(1,68)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:PHE:N	17	0.42
(1,129)	1:A:70:HIS:C	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	5	0.42
(1,135)	1:A:74:HIS:C	1:A:75:GLY:N	1:A:75:GLY:CA	1:A:75:GLY:C	2	0.41
(1,130)	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	1:A:72:LEU:N	6	0.41
(1,130)	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	1:A:72:LEU:N	8	0.41
(1,130)	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	1:A:72:LEU:N	9	0.41
(1,223)	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:CB	1:A:86:LEU:CG	1:A:86:LEU:CD1	18	0.4
(1,163)	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	1	0.4
(1,130)	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	1:A:72:LEU:N	4	0.39
(1,170)	1:A:95:ASN:N	1:A:95:ASN:CA	1:A:95:ASN:C	1:A:96:ASN:N	16	0.37



Key	ed from previous pag  Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( o )
(1,135)	1:A:74:HIS:C	1:A:75:GLY:N	1:A:75:GLY:CA	1:A:75:GLY:C	29	0.37
(1,129)	1:A:70:HIS:C	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	17	0.37
(1,37)	1:A:20:SER:C	1:A:21:SER:N	1:A:21:SER:CA	1:A:21:SER:C	9	0.36
(1,5)	1:A:4:THR:C	1:A:5:VAL:N	1:A:5:VAL:CA	1:A:5:VAL:C	22	0.35
(1,223)	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:CB	1:A:86:LEU:CG	1:A:86:LEU:CD1	26	0.35
(1,130)	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	1:A:72:LEU:N	29	0.35
(1,69)	1:A:36:GLU:C	1:A:37:PHE:N	1:A:37:PHE:CA	1:A:37:PHE:C	1	0.34
(1,5)	1:A:4:THR:C	1:A:5:VAL:N	1:A:5:VAL:CA	1:A:5:VAL:C	1	0.33
(1,165)	1:A:92:ASN:C	1:A:93:THR:N	1:A:93:THR:CA	1:A:93:THR:C	22	0.33
(1,160)	1:A:89:VAL:N	1:A:89:VAL:CA	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	21	0.3
(1,3)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	3	0.29
(1,199)	1:A:110:LYS:C	1:A:111:ASN:N	1:A:111:ASN:CA	1:A:111:ASN:C	14	0.29
(1,3)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	20	0.28
(1,223)	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:CB	1:A:86:LEU:CG	1:A:86:LEU:CD1	4	0.28
(1,129)	1:A:70:HIS:C	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	6	0.28
(1,116)	1:A:63:PRO:N	1:A:63:PRO:CA	1:A:63:PRO:C	1:A:64:LEU:N	2	0.28
(1,161)	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	21	0.27
(1,9)	1:A:6:SER:C	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	28	0.26
(1,37)	1:A:20:SER:C	1:A:21:SER:N	1:A:21:SER:CA	1:A:21:SER:C	11	0.26
(1,135)	1:A:74:HIS:C	1:A:75:GLY:N	1:A:75:GLY:CA	1:A:75:GLY:C	12	0.26
(1,130)	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	1:A:72:LEU:N	15	0.26
(1,129)	1:A:70:HIS:C	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	26	0.26
(1,223)	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:CB	1:A:86:LEU:CG	1:A:86:LEU:CD1	27	0.25
(1,129)	1:A:70:HIS:C	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	3	0.25
(1,10)	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:THR:N	14	0.25
(1,199)	1:A:110:LYS:C	1:A:111:ASN:N	1:A:111:ASN:CA	1:A:111:ASN:C	9	0.24
(1,15)	1:A:9:GLU:C	1:A:10:ASP:N	1:A:10:ASP:CA	1:A:10:ASP:C	21	0.24
(1,217)	1:A:120:ILE:C	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	7	0.23
(1,20)	1:A:12:GLN:N	1:A:12:GLN:CA	1:A:12:GLN:C	1:A:13:ARG:N	26	0.22
(1,165)	1:A:92:ASN:C	1:A:93:THR:N	1:A:93:THR:CA	1:A:93:THR:C	11	0.22
(1,130)	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	1:A:72:LEU:N	5	0.22
(1,69)	1:A:36:GLU:C	1:A:37:PHE:N	1:A:37:PHE:CA	1:A:37:PHE:C	20	0.21
(1,217)	1:A:120:ILE:C	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	29	0.21
(1,223)	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:CB	1:A:86:LEU:CG	1:A:86:LEU:CD1	15	0.2
(1,129)	1:A:70:HIS:C	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	24	0.19
(1,68)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:PHE:N	7	0.18
(1,223)	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:CB	1:A:86:LEU:CG	1:A:86:LEU:CD1	25	0.18
(1,223)	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:CB	1:A:86:LEU:CG	1:A:86:LEU:CD1	21	0.16
(1,15)	1:A:9:GLU:C	1:A:10:ASP:N	1:A:10:ASP:CA	1:A:10:ASP:C	9	0.16
(1,116)	1:A:63:PRO:N	1:A:63:PRO:CA	1:A:63:PRO:C	1:A:64:LEU:N	24	0.15
(1,163)	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	20	0.13
(1,130)	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	1:A:72:LEU:N	17	0.13
(1,69)	1:A:36:GLU:C	1:A:37:PHE:N	1:A:37:PHE:CA	1:A:37:PHE:C	4	0.12
(1,69)	1:A:36:GLU:C	1:A:37:PHE:N	1:A:37:PHE:CA	1:A:37:PHE:C	22	0.12
(1,223)	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:CB	1:A:86:LEU:CG	1:A:86:LEU:CD1	12	0.11
(1,69)	1:A:36:GLU:C	1:A:37:PHE:N	1:A:37:PHE:CA	1:A:37:PHE:C	10	0.1
(1,170)	1:A:95:ASN:N	1:A:95:ASN:CA	1:A:95:ASN:C	1:A:96:ASN:N	8	0.09
(1,130)	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	1:A:72:LEU:N	23	0.09
(1,217)	1:A:120:ILE:C	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	1	0.08
(1,169)	1:A:94:ASP:C	1:A:95:ASN:N	1:A:95:ASN:CA	1:A:95:ASN:C	29	0.08
(1,130) $(1,130)$	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	1:A:72:LEU:N	21	0.07
(-,-50)	1.11., 1. 0.11., 1.	1.1.1.1.0211.011	1	1		ed on nert nage



Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation $(\circ)$
(1,116)	1:A:63:PRO:N	1:A:63:PRO:CA	1:A:63:PRO:C	1:A:64:LEU:N	17	0.06
(1,169)	1:A:94:ASP:C	1:A:95:ASN:N	1:A:95:ASN:CA	1:A:95:ASN:C	20	0.05
(1,69)	1:A:36:GLU:C	1:A:37:PHE:N	1:A:37:PHE:CA	1:A:37:PHE:C	5	0.03
(1,69)	1:A:36:GLU:C	1:A:37:PHE:N	1:A:37:PHE:CA	1:A:37:PHE:C	27	0.03
(1,163)	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	12	0.03
(1,223)	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:CB	1:A:86:LEU:CG	1:A:86:LEU:CD1	7	0.02
(1,215)	1:A:119:SER:C	1:A:120:ILE:N	1:A:120:ILE:CA	1:A:120:ILE:C	13	0.01

