

# wwPDB NMR Structure Validation Summary Report (i)

#### Feb 25, 2020 – 04:40 PM CST

PDB ID : 2LUZ

Title : Solution NMR Structure of CalU16 from Micromonospora echinospora, North-

east Structural Genomics Consortium (NESG) Target MiR12

Authors: Ramelot, T.A.; Yang, Y.; Lee, H.; Pederson, K.; Lee, D.; Kohan, E.; Jan-

jua, H.; Xiao, R.; Acton, T.B.; Everett, J.K.; Wrobel, R.L.; Bingman, C.A.; Singh, S.; Thorson, J.S.; Prestegard, J.H.; Montelione, G.T.; Phillips Jr., G.N.; Kennedy, M.A.; Enzyme Discovery for Natural Product Biosynthesis (NatPro);

Northeast Structural Genomics Consortium (NESG)

Deposited on : 2012-06-22

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

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

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

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

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)

NmrClust : Kelley et al. (1996)

MolProbity: 4.02b-467

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

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

PANAV : Wang et al. (2010)

ShiftChecker : 2.6.dev1

BMRB Restraints Analalysis : v1.2

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

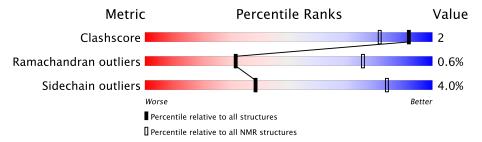
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.6.dev1

# 1 Overall quality at a glance (i)

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

The overall completeness of chemical shifts assignment is 65%.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain			
1	A	192	78%	•	16%	5%



# 2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 20 models. Model 16 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

Well-defined (core) protein residues					
Well-defined core	Residue rar	nge (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model	
1	A:6-A:141,	A:166-A:180	0.53	16	
	(151)				

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 3 clusters and 1 single-model cluster was found.

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



# 3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2765 atoms, of which 1353 are hydrogens and 0 are deuteriums.

• Molecule 1 is a protein called CalU16.

Mol	Chain	Residues			Atom	ıs			Trace
1	Λ	100	Total	С	Н	N	О	S	0
1	A	182	2765	875	1353	250	279	8	U

There are 10 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	-9	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8KNE9
A	-8	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8KNE9
A	-7	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8KNE9
A	-6	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8KNE9
A	-5	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8KNE9
A	-4	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8KNE9
A	-3	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8KNE9
A	-2	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8KNE9
A	-1	SER	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8KNE9
A	0	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8KNE9

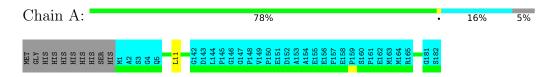


# 4 Residue-property plots (i)

#### 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.

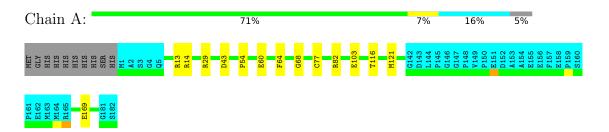
• Molecule 1: CalU16



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

The representative model is number 16. Colouring as in section 4.1 above.

• Molecule 1: CalU16





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



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

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

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

Software name	Classification	Version
CNS	refinement	1.3
CNS	structure solution	1.3
CNS	geometry optimization	1.3
CYANA	refinement	3.0
CYANA	geometry optimization	3.0
CYANA	structure solution	3.0
AutoStructure	refinement	ASDP-1.0
TALOS+	geometry optimization	
PALES	geometry optimization	
FMCGUI	refinement	

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

Chemical shift file(s)	2luz_nmr.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	2226
Number of shifts mapped to atoms	1416
Number of unparsed shifts	202
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	608
Assignment completeness (well-defined parts)	65%

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



# 6 Model quality (i)

## 6.1 Standard geometry (i)

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

## 6.2 Too-close contacts (i)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1192	1158	1158	4±2
All	All	23840	23160	23160	75

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 2.

5 of 47 unique clashes are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom-1	Atom 2	Clash(Å)	$Distance(\mathring{A})$	$oxed{Models}$	
Atom-1	$egin{array}{cccc} Atom-1 & Atom-2 & Clash(A) \end{array}$		Distance(A)	Worst	Total
1:A:60:GLU:HB2	1:A:77:CYS:SG	0.65	2.31	6	8
1:A:92:LYS:HG3	1:A:121:MET:SD	0.62	2.33	18	2
1:A:41:CYS:SG	1:A:99:LEU:HD23	0.56	2.40	2	1
1:A:88:VAL:HG13	1:A:93:PRO:HB3	0.53	1.80	8	1
1:A:11:LEU:HB2	1:A:177:LEU:HB3	0.53	1.79	12	2

## 6.3 Torsion angles (i)

#### 6.3.1 Protein backbone (i)

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



Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Perce	ntiles
1	A	151/192 (79%)	139±2 (92±2%)	$11\pm 2 \ (8\pm 2\%)$	1±1 (1±1%)	31	76
All	All	3020/3840 (79%)	2774 (92%)	229 (8%)	17 (1%)	31	76

5 of 11 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	69	ASN	3
1	A	93	PRO	3
1	A	90	GLU	2
1	A	68	GLY	2
1	A	94	ASP	1

#### 6.3.2 Protein sidechains (i)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles		
1	A	124/156 (79%)	119±2 (96±2%)	5±2 (4±2%)	38	84	
All	All	2480/3120 (79%)	2380 (96%)	100 (4%)	38	84	

5 of 39 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	11	LEU	12
1	A	13	ARG	9
1	A	103	GLU	7
1	A	22	ARG	7
1	A	141	ARG	5

## 6.3.3 RNA (i)

There are no RNA molecules in this entry.



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

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

## 6.5 Carbohydrates (i)

There are no carbohydrates in this entry.

## 6.6 Ligand geometry (i)

There are no ligands in this entry.

## 6.7 Other polymers (i)

There are no such molecules in this entry.

## 6.8 Polymer linkage issues (i)

There are no chain breaks in this entry.



# 7 Chemical shift validation (i)

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 65% for the well-defined parts and 64% for the entire structure.

#### 7.1 Chemical shift list 1

File name: 2luz\_nmr.cif

Chemical shift list name: nef\_chemical\_shift\_list\_2luz.mr

#### 7.1.1 Bookkeeping (i)

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

Total number of shifts	2226
Number of shifts mapped to atoms	1416
Number of unparsed shifts	202
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	608
Number of shift outliers (ShiftChecker)	2

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

• Chemical shift has been reported more than once. First 5 (of 202) occurrences are reported below.

Shift ID	Chain	Res	Type	Atom		Shift Dat	a
	Chain	nes	Type	Atom	Value	Uncertainty	Ambiguity
7	A	1	MET	HE%	2.010	0.020	1
8	A	1	MET	HE%	2.010	0.020	1
17	A	2	ALA	HB%	1.370	0.020	1
18	A	2	ALA	HB%	1.370	0.020	1
55	A	6	ALA	HB%	1.360	0.020	1

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

• No matching atoms found in structure. First 5 (of 608) occurences are reported below.

Chain	Pos	Type	Atom		Shift Dat	a
Chain	rtes	Type	Atom	Value	Shift Dat Uncertainty	Ambiguity
A	60	GLU	HBy	2.18	0.02	2
A	98	GLU	HGx	2.48	0.02	2



Continued from previous page...

Chain	Pag	Tuno	Atom		Shift Dat	a
Chain	nes	туре	Atom	Value	Shift Dat Uncertainty	Ambiguity
A	150	PRO	HDy	3.68	0.02	2
A	17	PRO	HBx	1.99	0.02	2
A	16	ILE	HG1y	1.34	0.02	2

#### 7.1.2 Chemical shift referencing (i)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction $\pm$ precision, $ppm$	Suggested action
$^{13}\mathrm{C}_{\alpha}$	182	$-0.14 \pm 0.09$	None needed ( $< 0.5 \text{ ppm}$ )
$^{13}C_{\beta}$	163	$-0.06 \pm 0.13$	None needed ( $< 0.5 \text{ ppm}$ )
<sup>13</sup> C′	167	$0.15 \pm 0.08$	None needed (< 0.5 ppm)
$^{15}N$	169	$-0.61 \pm 0.35$	None needed (imprecise)

#### 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 65%, i.e. 1205 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1867. 22 out of 22 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	$^{1}\mathrm{H}$	$^{13}\mathbf{C}$	$^{15}{ m N}$
Backbone	719/741 (97%)	281/295 (95%)	$294/302 \ (97\%)$	144/144 (100%)
Sidechain	388/999 (39%)	54/585 (9%)	311/359 (87%)	23/55 (42%)
Aromatic	98/127 (77%)	48/66 (73%)	43/53 (81%)	7/8 (88%)
Overall	1205/1867~(65%)	383/946 (40%)	648/714 (91%)	174/207 (84%)

# 7.1.4 Statistically unusual chemical shifts (i)

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

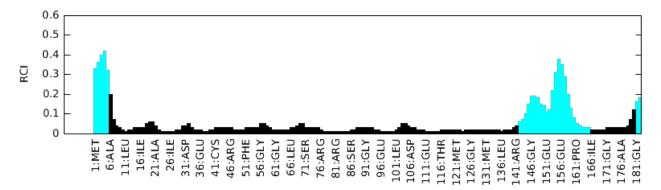
Mol	Chain	$\operatorname{Res}$	Type	Atom	Shift, $ppm$	Expected range, ppm	Z-score
1	A	80	PRO	HA	2.25	6.05 - 2.75	-6.5
1	A	129	TRP	HE1	12.94	12.85 - 7.35	5.2



#### 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

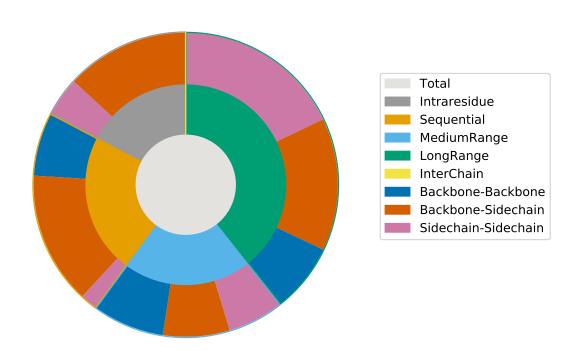
#### 8.1 Distance restraints summary

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

Destusiate tame	D D1/II4)	$\mathbf{B} ext{-}\mathbf{S}^2(\mathbf{H}^4)$	S-S <sup>3</sup> (H <sup>4</sup> )	Total		
Restraints type	$\mathbf{B} ext{-}\mathbf{B}^1(\mathbf{H}^4)$	<b>D-S</b> -( <b>I</b> 1-)	S-S*( <b>I</b> 1-)	$Total(H^4)$	$RR^5$	$\%^6$
Intraresidue ( i-j =0)	1(0)	355(0)	113(0)	469(0)	2.6	17.3
Sequential ( i-j =1)	183(0)	381(0)	50(0)	614(0)	3.4	22.6
Medium range ( $ i-j >1$ and $ i-j <5$ )	207(104)	192(0)	162(0)	561(104)	3.1	20.7
Long range ( i-j ≥5)	199(88)	382(0)	486(0)	1067(88)	5.9	39.4
Inter chain	0(0)	0(0)	0(0)	0(0)	0.0	0.0
Total	590(192)	1310(0)	811(0)	2711(192)	14.9	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





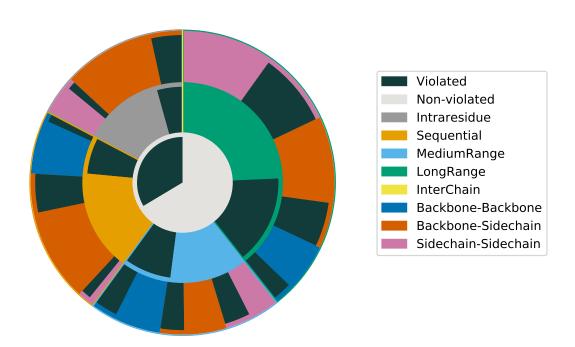
## 8.2 Distance violations summary

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

Dogtosinta tema	$B-B^{1}(\%^{4})$	$B-S^2(\%^4)$	$S-S^3(\%^4)$	Total		
Restraints type	<b>D-D</b> (%)	<b>D-3</b> (%)	S-S'(%)	$Total(\%^4)$	$\mathrm{RR}^5$	$\%^6$
Intraresidue ( i-j =0)	1(100.0)	92(25.9)	24(21.2)	117(24.9)	0.6	12.9
Sequential ( i-j =1)	25(13.7)	114(29.9)	29(58.0)	168(27.4)	0.9	18.5
Medium range ( $ i-j >1$ and $ i-j <5$ )	71(34.3)	70(36.5)	76(46.9)	217(38.7)	1.2	23.8
Long range ( i-j ≥5)	59(29.6)	131(34.3)	218(44.9)	408(38.2)	2.2	44.8
Inter chain	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Total	156(26.4)	407(31.1)	347(42.8)	910(33.6)	5.0	100.0

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

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





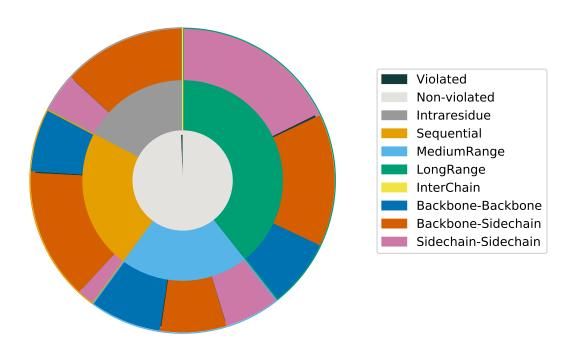
## 8.3 Consistent distance violations summary

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

Dogtmoints 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)	0(0.0)	1(0.9)	1(0.2)	0.0	6.7
Sequential ( i-j =1)	0(0.0)	4(1.0)	0(0.0)	4(0.7)	0.0	26.7
Medium range ( $ i-j >1$ and $ i-j <5$ )	0(0.0)	3(1.6)	1(0.6)	4(0.7)	0.0	26.7
Long range ( i-j ≥5)	0(0.0)	0(0.0)	6(1.2)	6(0.6)	0.0	40.0
Inter chain	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Total	0(0.0)	7(0.5)	8(1.0)	15(0.6)	0.1	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)	No. of violated restraints per model	Max violation (Å)
0-0.2	109.8	0.2
0.2-0.5	63.0	0.5
0.5-1.0	43.6	1.0
1.0-2.0	27.4	2.0
2.0-5.0	10.3	4.76
5.0<	None	None

#### 8.5 Distance violations in ensemble

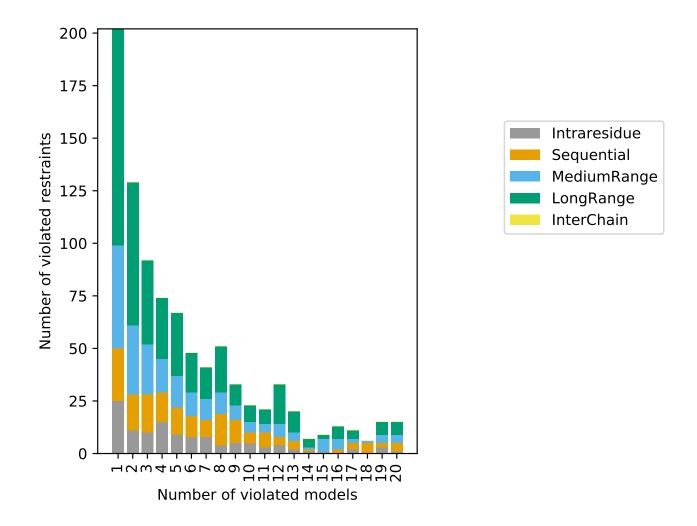
The restraints are grouped based on the number of violated models and listed here.

I		f violat	ted re	strair	$\operatorname{nts}$	No. of violated models
$IR^1$	$SQ^2$	$MR^3$	$LR^4$	$IC^5$	Total	No. of violated models
25	25	49	103	0	202	1
11	17	33	68	0	129	2
10	18	24	40	0	92	3
15	14	16	29	0	74	4
9	13	15	30	0	67	5
8	10	11	19	0	48	6
8	8	10	15	0	41	7
4	15	10	22	0	51	8
5	11	7	10	0	33	9
5	5	5	8	0	23	10
3	7	4	7	0	21	11
4	4	6	19	0	33	12
2	4	4	10	0	20	13
1	1	1	4	0	7	14
1	0	6	2	0	9	15
0	2	5	6	0	13	16
2	3	2	4	0	11	17
0	5	1	0	0	6	18
3	2	4	6	0	15	19
1	4	4	6	0	15	20

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



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



352 intraresidue restraints, 446 sequential restraints, 344 medium range restraints,659 long range restraints and 0 inter chain restraints are not violated. There are totally 1801 restrains not violated in any of the models

#### 8.6 Violations in each model

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

Model ID		N	o. of v	Mean (Å)	Max (Å)			
Model ID	$IR^1$	$SQ^2$	$ m MR^3$	$LR^4$	$  IC^5  $	Total	Mean (A)	Max (A)
1	28	51	80	99	0	258	0.56	3.78
2	38	50	61	116	0	265	0.45	3.12
3	28	55	57	104	0	244	0.53	3.7
4	34	60	55	108	0	257	0.53	4.03
5	42	58	66	110	0	276	0.52	3.86



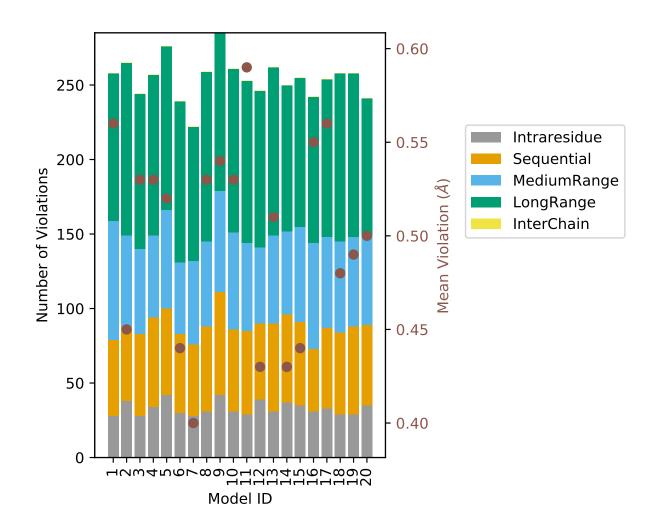
Continued from previous page...

Model ID		N	o. of v	iolati	ons		Mean (Å)	Max (Å)
Model 1D	$IR^1$	$SQ^2$	$MR^3$	$LR^4$	$IC^5$	Total	Mean (A)	Max (A)
6	30	53	48	108	0	239	0.44	2.61
7	28	48	56	90	0	222	0.4	2.24
8	31	57	57	114	0	259	0.53	3.93
9	42	69	68	106	0	285	0.54	4.76
10	31	55	65	110	0	261	0.53	4.38
11	29	56	59	109	0	253	0.59	4.75
12	39	51	51	105	0	246	0.43	2.61
13	31	59	59	113	0	262	0.51	3.9
14	37	59	56	98	0	250	0.43	2.45
15	35	56	64	100	0	255	0.44	3.41
16	31	42	71	98	0	242	0.55	3.45
17	33	54	61	106	0	254	0.56	3.66
18	29	55	61	113	0	258	0.48	3.62
19	29	59	60	110	0	258	0.49	2.77
20	35	54	60	92	0	241	0.5	4.23

 $<sup>^1 \</sup>rm intraresidue$  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

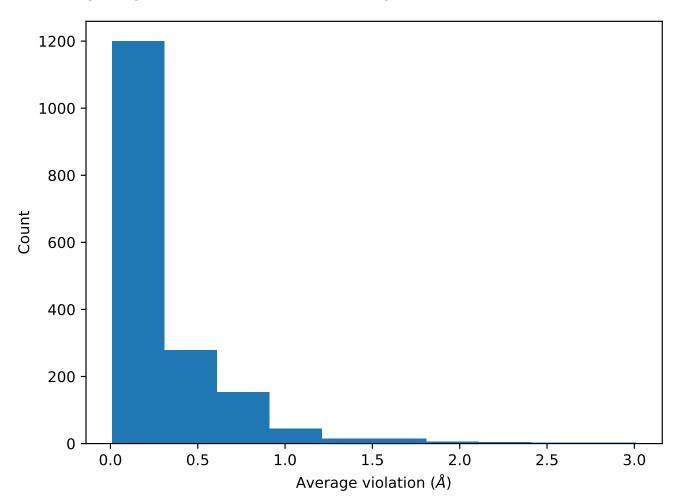




#### 8.7 Most violated distance restraints

#### 8.7.1 Histogram: Distribution of mean distance violation

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



#### 8.7.2 Table: Most violated distance restraints

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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	20	2.17	4.03
(1,458)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:18:ALA:H	20	0.44	0.86
(1,2636)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:178:VAL:H	20	0.79	1.15
(1,2635)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:177:LEU:H	20	0.56	0.7
(1,2529)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:166:ILE:H	20	0.36	0.56
(1,2257)	1:A:133:LEU:HB2	1:A:136:LEU:HB2	20	0.9	1.59



Continued from previous page...

(1,1849)         1:A:103:GLU:HB2         1:A:104:GLU:H         20         0.79         1.           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD21         1:A:109:LEU:HB2         20         1.18         1           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD22         1:A:109:LEU:HB2         20         1.18         1           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD23         1:A:109:LEU:HB2         20         1.18         1           (1,1818)         1:A:78:GLU:H         1:A:79:PRO:HB2         20         0.66         1.           (1,1530)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD21         20         0.79         1.           (1,1208)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD22         20         0.79         1.           (1,1208)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD23         20         0.79         1.           (1,1207)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD12         20         0.79         1.           (1,1207)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD12         20         1.04         2.           (1,1207)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD13         20         1.04         2.           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB1         1:A:139:PHE:HE1         20         1.04 <th< th=""><th>54 05 .4 .4 .4 28 84 84</th></th<>	54 05 .4 .4 .4 28 84 84
(1,1818)         1:A:101:LEU:HD21         1:A:109:LEU:HB2         20         1.18         1           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD22         1:A:109:LEU:HB2         20         1.18         1           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD23         1:A:109:LEU:HB2         20         1.18         1           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD23         1:A:109:LEU:HB2         20         1.18         1           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD23         1:A:109:LEU:HB2         20         0.66         1.           (1,1530)         1:A:57:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD21         20         0.79         1.           (1,1208)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD22         20         0.79         1.           (1,1208)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD23         20         0.79         1.           (1,1207)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD12         20         1.04         2.           (1,1207)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD12         20         1.04         2.           (1,1207)         1:A:40:AB:HB2         1:A:139:PHE:HE1         20         1.04         2.           (1,1041)         1:A:40:AB:HB2         1:A:139:PHE:HE1         20         1.14	.4 .4 .4 28 84
(1,1818)         1:A:101:LEU:HD22         1:A:109:LEU:HB2         20         1.18         1           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD23         1:A:109:LEU:HB2         20         1.18         1           (1,1530)         1:A:78:GLU:H         1:A:79:PRO:HB2         20         0.66         1.           (1,1208)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD21         20         0.79         1.           (1,1208)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD22         20         0.79         1.           (1,1208)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD23         20         0.79         1.           (1,1207)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD13         20         0.79         1.           (1,1207)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD12         20         1.04         2.           (1,1207)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD13         20         1.04         2.           (1,1207)         1:A:46:ARG:HB2         1:A:139:PHE:HE1         20         1.04         2.           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB1         1:A:139:PHE:HE1         20         1.14         2           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB3         1:A:139:PHE:HE1         20         1.14	.4 .4 28 .84
(1,1818)         1:A:101:LEU:HD23         1:A:109:LEU:HB2         20         1.18         1           (1,1530)         1:A:78:GLU:H         1:A:79:PRO:HB2         20         0.66         1.           (1,1208)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD21         20         0.79         1.           (1,1208)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD22         20         0.79         1.           (1,1208)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD23         20         0.79         1.           (1,1207)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD11         20         1.04         2.           (1,1207)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD12         20         1.04         2.           (1,1207)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD13         20         1.04         2.           (1,1207)         1:A:451:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD13         20         1.04         2.           (1,114)         1:A:46:ARG:HB2         1:A:139:PHE:HE1         20         2.0         3           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB1         1:A:139:PHE:HE1         20         1.14         2           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB3         1:A:139:PHE:HE1         20         1.14         2 </td <td>.4 28 84</td>	.4 28 84
(1,1530)         1:A:78:GLU:H         1:A:79:PRO:HB2         20         0.66         1.           (1,1208)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD21         20         0.79         1.           (1,1208)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD22         20         0.79         1.           (1,1208)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD23         20         0.79         1.           (1,1207)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD11         20         1.04         2.           (1,1207)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD12         20         1.04         2.           (1,1207)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD13         20         1.04         2.           (1,1207)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD13         20         1.04         2.           (1,1207)         1:A:45:PHE:HE1         1:A:36:LEU:HD13         20         1.04         2.           (1,114)         1:A:46:ARG:HB2         1:A:139:PHE:HE1         20         2.0         3           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB3         1:A:139:PHE:HE1         20         1.14         2           (1,1041)         1:A:33:TRP:HB2         1:A:33:TRP:HB1         20         1.14         2	28
(1,1208)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD21         20         0.79         1.           (1,1208)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD22         20         0.79         1.           (1,1208)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD23         20         0.79         1.           (1,1207)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD11         20         1.04         2.           (1,1207)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD12         20         1.04         2.           (1,1207)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD13         20         1.04         2.           (1,1207)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD13         20         1.04         2.           (1,1207)         1:A:46:ARG:HB2         1:A:139:PHE:HE1         20         2.0         3           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB1         1:A:139:PHE:HE1         20         1.14         2           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB2         1:A:139:PHE:HE1         20         1.14         2           (1,1041)         1:A:34:VAL:HB3         1:A:139:PHE:HE1         20         0.23         0           (1,882)         1:A:34:VAL:HB         1:A:103:GLU:HG2         19         0.48         1 <td>.84</td>	.84
(1,1208)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD22         20         0.79         1.           (1,1208)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD23         20         0.79         1.           (1,1207)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD11         20         1.04         2.           (1,1207)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD12         20         1.04         2.           (1,1207)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD13         20         1.04         2.           (1,114)         1:A:46:ARG:HB2         1:A:139:PHE:HE1         20         2.0         3           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB1         1:A:139:PHE:HE1         20         1.14         2           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB2         1:A:139:PHE:HE1         20         1.14         2           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB3         1:A:139:PHE:HE1         20         1.14         2           (1,1017)         1:A:38:TRP:HB2         1:A:38:TRP:HE1         20         0.23         0.           (1,882)         1:A:34:VAL:HB         1:A:103:GLU:HG2         19         0.48         1.           (1,810)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:37:VAL:HG23         19         0.88         2	
(1,1208)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD23         20         0.79         1.           (1,1207)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD11         20         1.04         2.           (1,1207)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD12         20         1.04         2.           (1,1207)         1:A:51:PHE:HE1         1:A:66:LEU:HD13         20         1.04         2.           (1,1114)         1:A:46:ARG:HB2         1:A:139:PHE:HE1         20         2.0         3           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB1         1:A:139:PHE:HE1         20         1.14         2           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB2         1:A:139:PHE:HE1         20         1.14         2           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB3         1:A:139:PHE:HE1         20         1.14         2           (1,1041)         1:A:34:VAL:HB3         1:A:38:TRP:HE1         20         0.23         0.           (1,882)         1:A:34:VAL:HB         1:A:37:VAL:HG2         19         0.48         1.           (1,810)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:37:VAL:HG23         19         0.88         2           (1,810)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:37:VAL:HG23         19         0.88         2	84
(1,1207)       1:A:51:PHE:HE1       1:A:66:LEU:HD11       20       1.04       2.         (1,1207)       1:A:51:PHE:HE1       1:A:66:LEU:HD12       20       1.04       2.         (1,1207)       1:A:51:PHE:HE1       1:A:66:LEU:HD13       20       1.04       2.         (1,1114)       1:A:46:ARG:HB2       1:A:139:PHE:HE1       20       2.0       3         (1,1041)       1:A:40:ALA:HB1       1:A:139:PHE:HE1       20       1.14       2         (1,1041)       1:A:40:ALA:HB2       1:A:139:PHE:HE1       20       1.14       2         (1,1041)       1:A:40:ALA:HB3       1:A:139:PHE:HE1       20       1.14       2         (1,1017)       1:A:38:TRP:HB2       1:A:38:TRP:HE1       20       0.23       0.         (1,882)       1:A:34:VAL:HB       1:A:103:GLU:HG2       19       0.48       1.         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG21       19       0.88       2         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG23       19       0.88       2         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG23       19       0.88       2	~ -
(1,1207)       1:A:51:PHE:HE1       1:A:66:LEU:HD12       20       1.04       2.         (1,1207)       1:A:51:PHE:HE1       1:A:66:LEU:HD13       20       1.04       2.         (1,1114)       1:A:46:ARG:HB2       1:A:139:PHE:HE1       20       2.0       3         (1,1041)       1:A:40:ALA:HB1       1:A:139:PHE:HE1       20       1.14       2         (1,1041)       1:A:40:ALA:HB2       1:A:139:PHE:HE1       20       1.14       2         (1,1041)       1:A:40:ALA:HB3       1:A:139:PHE:HE1       20       1.14       2         (1,1017)       1:A:38:TRP:HB2       1:A:38:TRP:HE1       20       0.23       0.         (1,882)       1:A:34:VAL:HB       1:A:103:GLU:HG2       19       0.48       1.         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG21       19       0.88       2         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG23       19       0.88       2         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG23       19       0.88       2	.84
(1,1207)       1:A:51:PHE:HE1       1:A:66:LEU:HD13       20       1.04       2.         (1,1114)       1:A:46:ARG:HB2       1:A:139:PHE:HE1       20       2.0       3         (1,1041)       1:A:40:ALA:HB1       1:A:139:PHE:HE1       20       1.14       2         (1,1041)       1:A:40:ALA:HB2       1:A:139:PHE:HE1       20       1.14       2         (1,1041)       1:A:40:ALA:HB3       1:A:139:PHE:HE1       20       1.14       2         (1,1017)       1:A:38:TRP:HB2       1:A:38:TRP:HE1       20       0.23       0.         (1,882)       1:A:34:VAL:HB       1:A:103:GLU:HG2       19       0.48       1.         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG21       19       0.88       2         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG23       19       0.88       2         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG23       19       0.88       2	.09
(1,1114)       1:A:46:ARG:HB2       1:A:139:PHE:HE1       20       2.0       3         (1,1041)       1:A:40:ALA:HB1       1:A:139:PHE:HE1       20       1.14       2         (1,1041)       1:A:40:ALA:HB2       1:A:139:PHE:HE1       20       1.14       2         (1,1041)       1:A:40:ALA:HB3       1:A:139:PHE:HE1       20       1.14       2         (1,1017)       1:A:38:TRP:HB2       1:A:38:TRP:HE1       20       0.23       0.         (1,882)       1:A:34:VAL:HB       1:A:103:GLU:HG2       19       0.48       1.         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG21       19       0.88       2         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG23       19       0.88       2         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG23       19       0.88       2	.09
(1,1041)       1:A:40:ALA:HB1       1:A:139:PHE:HE1       20       1.14       2         (1,1041)       1:A:40:ALA:HB2       1:A:139:PHE:HE1       20       1.14       2         (1,1041)       1:A:40:ALA:HB3       1:A:139:PHE:HE1       20       1.14       2         (1,1017)       1:A:38:TRP:HB2       1:A:38:TRP:HE1       20       0.23       0.         (1,882)       1:A:34:VAL:HB       1:A:103:GLU:HG2       19       0.48       1.         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG21       19       0.88       2         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG22       19       0.88       2         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG23       19       0.88       2	.09
(1,1041)       1:A:40:ALA:HB2       1:A:139:PHE:HE1       20       1.14       2         (1,1041)       1:A:40:ALA:HB3       1:A:139:PHE:HE1       20       1.14       2         (1,1017)       1:A:38:TRP:HB2       1:A:38:TRP:HE1       20       0.23       0.         (1,882)       1:A:34:VAL:HB       1:A:103:GLU:HG2       19       0.48       1.         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG21       19       0.88       2         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG22       19       0.88       2         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG23       19       0.88       2	5.4
(1,1041)       1:A:40:ALA:HB3       1:A:139:PHE:HE1       20       1.14       2         (1,1017)       1:A:38:TRP:HB2       1:A:38:TRP:HE1       20       0.23       0.         (1,882)       1:A:34:VAL:HB       1:A:103:GLU:HG2       19       0.48       1.         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG21       19       0.88       2         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG22       19       0.88       2         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG23       19       0.88       2	.5
(1,1017)       1:A:38:TRP:HB2       1:A:38:TRP:HE1       20       0.23       0.         (1,882)       1:A:34:VAL:HB       1:A:103:GLU:HG2       19       0.48       1.         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG21       19       0.88       2         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG22       19       0.88       2         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG23       19       0.88       2	.5
(1,882)       1:A:34:VAL:HB       1:A:103:GLU:HG2       19       0.48       1.         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG21       19       0.88       2         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG22       19       0.88       2         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG23       19       0.88       2         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG23       19       0.88       2	.5
(1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG21       19       0.88       2         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG22       19       0.88       2         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG23       19       0.88       2	.28
(1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG22       19       0.88       2         (1,810)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG23       19       0.88       2	.02
(1,810) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:37:VAL:HG23 19 0.88 2	3.0
	0.0
(1,603) 1:A:24:ILE:HG21 1:A:114:HIS:HB2 19 0.6 1.	3.0
	.04
(1,603) 1:A:24:ILE:HG22 1:A:114:HIS:HB2 19 0.6 1.	.04
(1,603) 1:A:24:ILE:HG23 1:A:114:HIS:HB2 19 0.6 1.	.04
(1,600) 1:A:24:ILE:HG12 1:A:174:TRP:HZ3 19 0.37 0.	.79
(1,2703) 1:A:179:HIS:H 1:A:179:HIS:HB3 19 0.11 0.	14
(1,2664) 1:A:177:LEU:H 1:A:177:LEU:HB3 19 0.08 0.	.13
(1,2552) 1:A:166:ILE:HG12 1:A:167:SER:HA 19 0.54 0.	74
(1,1850) 1:A:103:GLU:HB2 1:A:105:GLY:H 19 1.34 2.	.05
(1,1712) 1:A:92:LYS:HB2 1:A:92:LYS:HD2 19 0.3 0.	.75
(1,1680) 1:A:89:TYR:HB2 1:A:92:LYS:HD2 19 1.25 2.	.05
(1,15) 1:A:22:ARG:H 1:A:116:THR:O 19 0.13 0.	.22
(1,137) 1:A:130:GLU:H 1:A:126:GLY:O 19 0.12 0.	.22
(1,1365) 1:A:64:PHE:HE1 1:A:66:LEU:HD11 19 1.59 2.	.83
(1,1365) 1:A:64:PHE:HE1 1:A:66:LEU:HD12 19 1.59 2.	.83
(1,1365) 1:A:64:PHE:HE1 1:A:66:LEU:HD13 19 1.59 2.	.83
(1,1285) 1:A:56:GLY:HA2 1:A:64:PHE:HA 19 0.8 1.	.47
(1,1104) 1:A:46:ARG:H 1:A:47:ILE:HG12 19 0.57 1	
(1,518) 1:A:22:ARG:H 1:A:23:SER:HB2 18 0.87 1.	.3
(1,2531) 1:A:165:ARG:HG2 1:A:166:ILE:H 18 0.6 1.	.3
(1,1320) 1:A:59:ARG:HG2 1:A:62:GLY:HA2 18 1.72 2.	
(1,1269) 1:A:55:LYS:HB2 1:A:56:GLY:H 18 0.57 1.	.12



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1243)	1:A:53:GLU:H	1:A:54:PRO:HD2	18	0.23	0.56
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE1	18	0.54	1.91
(1,427)	1:A:16:ILE:H	1:A:17:PRO:HD2	17	0.16	0.23
(1,390)	1:A:14:ARG:HA	1:A:14:ARG:HG2	17	0.36	0.45
(1,366)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HB2	17	0.39	0.57
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD11	17	0.28	0.62
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD12	17	0.28	0.62
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD13	17	0.28	0.62
(1,269)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:174:TRP:HE1	17	0.57	1.13
(1,2038)	1:A:119:GLU:HB2	1:A:120:GLN:H	17	0.48	0.62
(1,1691)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HE2	17	2.42	4.75
(1,1686)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HD2	17	2.22	3.8
(1,1571)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:99:LEU:H	17	1.01	1.41
(1,1018)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:39:SER:HB2	17	0.46	1.19
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD11	17	0.59	1.31
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD12	17	0.59	1.31
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD13	17	0.59	1.31
(1,928)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:38:TRP:HD1	16	1.15	1.62
(1,895)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:HB2	16	0.33	0.66
(1,895)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:HB2	16	0.33	0.66
(1,895)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:HB2	16	0.33	0.66
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD11	16	1.98	3.11
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD12	16	1.98	3.11
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD13	16	1.98	3.11
(1,750)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HE1	16	1.55	3.08
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD21	16	0.19	1.08
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD22	16	0.19	1.08
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD23	16	0.19	1.08
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG21	16	0.48	1.47
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG22	16	0.48	1.47
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG23	16	0.48	1.47
(1,384)	1:A:14:ARG:H	1:A:20:GLU:HB2	16	0.96	1.72
(1,2547)	1:A:166:ILE:HB	1:A:169:GLU:HG2	16	0.78	1.79
(1,2161)	1:A:126:GLY:HA2	1:A:174:TRP:HZ3	16	0.49	0.89
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HB2	16	0.61	1.13
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HB2	16	0.61	1.13
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HB2	16	0.61	1.13
(1,179)	1:A:173:ALA:H	1:A:169:GLU:O	16	0.09	0.21
(1,1687)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HE2	16	2.27	4.08
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA2	16	1.28	2.18
(1,841)	1:A:32:ALA:HA	1:A:36:GLU:HB2	15	0.35	0.91
(1,771)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:104:GLU:HG2	15	1.36	2.27



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD11	15	0.39	0.81
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD12	15	0.39	0.81
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD13	15	0.39	0.81
(1,431)	1:A:16:ILE:H	1:A:20:GLU:HB2	15	0.45	0.73
(1,2477)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HG2	15	0.73	1.51
(1,1692)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HG2	15	1.93	4.23
(1,1688)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HG2	15	2.45	4.76
(1,1685)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:H	15	1.57	2.41
(1,1165)	1:A:49:ARG:HB2	1:A:49:ARG:HD2	15	0.25	0.34
(1,3)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:O	14	0.05	0.11
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:169:GLU:HG2	14	0.78	1.67
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:169:GLU:HG2	14	0.78	1.67
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:169:GLU:HG2	14	0.78	1.67
(1,2442)	1:A:155:GLU:HB2	1:A:156:GLU:H	14	0.6	0.96
(1,1999)	1:A:116:THR:HG21	1:A:121:MET:HB2	14	0.23	0.71
(1,1999)	1:A:116:THR:HG22	1:A:121:MET:HB2	14	0.23	0.71
(1,1999)	1:A:116:THR:HG23	1:A:121:MET:HB2	14	0.23	0.71
(1,193)	1:A:5:GLN:H	1:A:5:GLN:HB2	14	0.26	0.58
(1,1119)	1:A:46:ARG:HD2	1:A:139:PHE:HE1	14	2.05	3.94
(1,1014)	1:A:38:TRP:HZ2	1:A:79:PRO:HG2	14	0.37	0.6
(1,776)	1:A:29:ARG:HG2	1:A:30:TYR:H	13	0.36	0.68
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD11	13	0.42	1.37
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD12	13	0.42	1.37
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD13	13	0.42	1.37
(1,749)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HD1	13	1.24	2.56
(1,43)	1:A:42:THR:H	1:A:38:TRP:O	13	0.05	0.14
(1,29)	1:A:29:ARG:H	1:A:6:ALA:O	13	0.11	0.22
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD11	13	0.24	0.47
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD12	13	0.24	0.47
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD13	13	0.24	0.47
(1,2712)	1:A:181:GLY:H	1:A:181:GLY:HA2	13	0.19	0.28
(1,2507)	1:A:164:MET:H	1:A:164:MET:HG2	13	0.28	0.91
(1,2418)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:H	13	0.55	1.1
(1,2383)	1:A:145:PRO:HB2	1:A:146:GLY:H	13	0.3	0.78
(1,200)	1:A:5:GLN:HG2	1:A:6:ALA:H	13	0.29	0.62
(1,1678)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:H	13	0.65	1.12
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE1	13	0.09	0.16
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE2	13	0.09	0.16
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE3	13	0.09	0.16
(1,1569)	1:A:82:ARG:HD2	1:A:100:ARG:HB2	13	1.18	2.58
(1,1286)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HB2	13	0.67	1.19
(1,1245)	1:A:53:GLU:HG2	1:A:54:PRO:HA	13	0.8	1.12



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1202)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:129:TRP:HH2	13	0.8	2.06
(1,1153)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HG2	13	0.75	1.98
(1,1121)	1:A:46:ARG:HG2	1:A:139:PHE:HE1	13	1.52	2.74
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD11	13	0.8	2.0
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD12	13	0.8	2.0
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD13	13	0.8	2.0
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD11	12	0.72	1.39
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD12	12	0.72	1.39
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD13	12	0.72	1.39
(1,818)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:137:GLY:HA2	12	1.31	2.61
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD21	12	1.57	1.89
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD22	12	1.57	1.89
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD23	12	1.57	1.89
(1,813)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HB2	12	1.66	3.89
(1,812)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HG	12	2.87	3.52
(1,811)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:H	12	2.7	3.26
(1,804)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:137:GLY:HA3	12	1.35	2.39
(1,802)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HB2	12	1.76	4.38
(1,800)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HA	12	3.01	3.98
(1,799)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:H	12	2.37	2.96
(1,798)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:109:LEU:HA	12	2.91	3.57
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG21	12	1.65	2.68
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG22	12	1.65	2.68
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG23	12	1.65	2.68
(1,796)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HB	12	1.27	2.23
(1,765)	1:A:29:ARG:HA	1:A:30:TYR:HD1	12	1.35	1.87
(1,530)	1:A:22:ARG:HD2	1:A:23:SER:H	12	0.61	1.23
(1,346)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:22:ARG:HG2	12	0.46	1.12
(1,346)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:22:ARG:HG2	12	0.46	1.12
(1,346)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:22:ARG:HG2	12	0.46	1.12
(1,270)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:174:TRP:HA	12	0.51	1.18
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB1	12	0.64	1.27
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB2	12	0.64	1.27
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB3	12	0.64	1.27
(1,2360)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:143:ASP:H	12	0.81	1.23
(1,2359)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:141:ARG:HD2	12	0.31	0.8
(1,195)	1:A:5:GLN:HA	1:A:5:GLN:HG2	12	0.39	0.79
(1,1860)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:107:GLY:H	12	0.57	1.38
(1,1859)	1:A:104:GLU:HA	1:A:107:GLY:H	12	0.09	0.32
(1,1836)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:HB2	12	0.81	1.76
(1,1649)	1:A:87:TRP:HE1	1:A:89:TYR:HE1	12	0.97	1.83
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB1	1:A:89:TYR:HD1	12	0.66	2.31



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB2	1:A:89:TYR:HD1	12	0.66	2.31
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB3	1:A:89:TYR:HD1	12	0.66	2.31
(1,1318)	1:A:59:ARG:HB2	1:A:59:ARG:HD2	12	0.41	0.79
(1,1246)	1:A:53:GLU:HG2	1:A:54:PRO:HD2	12	0.7	1.22
(1,1241)	1:A:53:GLU:H	1:A:53:GLU:HB2	12	0.12	0.19
(1,123)	1:A:123:VAL:H	1:A:119:GLU:O	12	0.09	0.13
(1,1214)	1:A:52:ILE:HA	1:A:53:GLU:HB2	12	0.78	0.86
(1,119)	1:A:116:THR:H	1:A:22:ARG:O	12	0.09	0.13
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD11	12	0.79	1.82
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD12	12	0.79	1.82
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD13	12	0.79	1.82
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD11	12	0.79	1.82
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD12	12	0.79	1.82
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD13	12	0.79	1.82
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD11	12	0.79	1.82
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD12	12	0.79	1.82
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD13	12	0.79	1.82
(1,897)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:37:VAL:H	11	0.13	0.23
(1,897)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:37:VAL:H	11	0.13	0.23
(1,897)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:37:VAL:H	11	0.13	0.23
(1,825)	1:A:31:ASP:HA	1:A:107:GLY:H	11	0.13	0.29
(1,747)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HB2	11	0.75	2.26
(1,461)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:21:ALA:H	11	0.21	0.31
(1,388)	1:A:14:ARG:H	1:A:22:ARG:HG2	11	0.61	1.51
(1,37)	1:A:39:SER:H	1:A:35:ASP:O	11	0.06	0.12
(1,297)	1:A:11:LEU:H	1:A:11:LEU:HG	11	0.1	0.12
(1,2518)	1:A:164:MET:HG2	1:A:165:ARG:H	11	0.1	0.22
(1,2492)	1:A:163:MET:H	1:A:164:MET:HG2	11	0.28	0.92
(1,2486)	1:A:162:GLU:HA	1:A:162:GLU:HG2	11	0.29	0.39
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:150:PRO:HD2	11	0.18	0.55
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:150:PRO:HD2	11	0.18	0.55
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:150:PRO:HD2	11	0.18	0.55
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:130:GLU:HB2	11	0.71	0.99
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:130:GLU:HB2	11	0.71	0.99
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:130:GLU:HB2	11	0.71	0.99
(1,191)	1:A:179:HIS:H	1:A:175:ALA:O	11	0.08	0.14
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:112:LEU:H	11	0.8	1.36
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:112:LEU:H	11	0.8	1.36
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:112:LEU:H	11	0.8	1.36
(1,1690)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:90:GLU:HB2	11	1.09	2.32
(1,1467)	1:A:74:ILE:H	1:A:74:ILE:HG12	11	0.68	0.81
(1,1273)	1:A:55:LYS:HD2	1:A:56:GLY:H	11	0.64	1.37



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1122)	1:A:46:ARG:HG2	1:A:47:ILE:H	11	0.2	0.34
(1,1092)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:ARG:HG2	11	0.98	1.24
(1,101)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:O	11	0.08	0.17
(1,1001)	1:A:38:TRP:HE1	1:A:79:PRO:HG2	11	0.56	1.21
(1,849)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:HB2	10	0.43	0.77
(1,849)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:HB2	10	0.43	0.77
(1,849)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:HB2	10	0.43	0.77
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG11	10	0.49	1.15
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG12	10	0.49	1.15
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG13	10	0.49	1.15
(1,774)	1:A:29:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HB2	10	0.31	0.88
(1,726)	1:A:27:ARG:HG3	1:A:28:GLN:H	10	0.05	0.12
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD21	10	0.41	0.72
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD22	10	0.41	0.72
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD23	10	0.41	0.72
(1,57)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:O	10	0.1	0.15
(1,520)	1:A:22:ARG:HA	1:A:22:ARG:HG2	10	0.27	0.48
(1,494)	1:A:20:GLU:H	1:A:20:GLU:HG2	10	0.17	0.69
(1,381)	1:A:13:ARG:HB2	1:A:13:ARG:HD2	10	0.25	0.31
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD11	10	0.09	0.15
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD12	10	0.09	0.15
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD13	10	0.09	0.15
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD11	10	0.09	0.15
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD12	10	0.09	0.15
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD13	10	0.09	0.15
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD11	10	0.09	0.15
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD12	10	0.09	0.15
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD13	10	0.09	0.15
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD11	10	0.1	0.17
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD12	10	0.1	0.17
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD13	10	0.1	0.17
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD21	10	0.07	0.18
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD22	10	0.07	0.18
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD23	10	0.07	0.18
(1,2522)	1:A:165:ARG:HA	1:A:165:ARG:HG2	10	0.34	0.41
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD11	10	0.56	1.25
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD12	10	0.56	1.25
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD13	10	0.56	1.25
(1,2471)	1:A:160:SER:HB2	1:A:162:GLU:H	10	0.25	0.78
(1,2465)	1:A:159:PRO:HG2	1:A:160:SER:H	10	0.37	0.86
(1,2417)	1:A:151:GLU:HA	1:A:151:GLU:HG2	10	0.35	0.77
(1,2392)	1:A:148:PRO:HD2	1:A:149:VAL:H	10	0.26	0.47



Continued from previous page...

1,2320	Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,2320)         1:A:139:PHE:H         1:A:144:LEU:HD13         10         0.43         0.87           (1,1684)         1:A:39:TYR:HD1         1:A:90:GLU:HG2         10         1.24         2.3           (1,1451)         1:A:71:SER:HB2         1:A:72:GLY:H         10         0.42         0.6           (1,124)         1:A:152:ALE:HD11         1:A:68:GLY:HA2         10         0.4         0.71           (1,1220)         1:A:52:ILE:HD11         1:A:68:GLY:HA2         10         0.4         0.71           (1,1220)         1:A:57:VAL:HG21         1:A:68:GLY:HA2         10         0.4         0.71           (1,920)         1:A:37:VAL:HG21         1:A:68:GLY:HA2         10         0.4         0.71           (1,968)         1:A:37:VAL:HG22         1:A:108:THR:HA         9         0.08         0.18           (1,968)         1:A:37:VAL:HG23         1:A:108:THR:HA         9         0.08         0.18           (1,998)         1:A:34:VAL:HG22         1:A:319:SER:H         9         0.3         0.52           (1,990)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         <	(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD11	10	0.43	0.87
(1,1684)         1:A:89:TYR:HD1         1:A:90:GLU:HG2         10         1.24         2.3           (1,1451)         1:A:71:SER:HB2         1:A:72:GLY:H         10         0.42         0.6           (1,124)         1:A:123:VAL:N         1:A:119:GLU:O         10         0.04         0.09           (1,1220)         1:A:52:ILE:HD11         1:A:68:GLY:HA2         10         0.4         0.71           (1,1220)         1:A:52:ILE:HD13         1:A:68:GLY:HA2         10         0.4         0.71           (1,968)         1:A:37:VAL:HG21         1:A:108:THR:HA         9         0.08         0.18           (1,968)         1:A:37:VAL:HG21         1:A:108:THR:HA         9         0.08         0.18           (1,968)         1:A:37:VAL:HG23         1:A:108:THR:HA         9         0.08         0.18           (1,968)         1:A:35:ASP:HB2         1:A:308:THR:HA         9         0.08         0.18           (1,939)         1:A:36:GLU:HG23         1:A:310:THR:HA         9         0.08         0.18           (1,990)         1:A:34:ALHG21         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.2	(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD12	10	0.43	0.87
(1,1451) 1:A:71:SER:HB2 1:A:72:GLY:H 10 0.42 0.6 (1,124) 1:A:123:VAL:N 1:A:119:GLU:O 10 0.04 0.09 (1,1220) 1:A:52:ILE:HD11 1:A:68:GLY:HA2 10 0.4 0.71 (1,1220) 1:A:52:ILE:HD12 1:A:68:GLY:HA2 10 0.4 0.71 (1,1220) 1:A:52:ILE:HD13 1:A:68:GLY:HA2 10 0.4 0.71 (1,1220) 1:A:52:ILE:HD13 1:A:68:GLY:HA2 10 0.4 0.71 (1,1220) 1:A:52:ILE:HD13 1:A:68:GLY:HA2 10 0.4 0.71 (1,968) 1:A:37:VAL:HG21 1:A:108:THR:HA 9 0.08 0.18 (1,968) 1:A:37:VAL:HG22 1:A:108:THR:HA 9 0.08 0.18 (1,968) 1:A:37:VAL:HG23 1:A:108:THR:HA 9 0.08 0.18 (1,998) 1:A:36:GLU:HB2 1:A:39:SER:H 9 0.03 0.52 (1,929) 1:A:35:ASP:HB2 1:A:39:SER:H 9 0.13 0.37 (1,890) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HG3 9 0.11 0.29 (1,890) 1:A:34:VAL:HG13 1:A:103:GLU:HG3 9 0.11 0.29 (1,890) 1:A:34:VAL:HG13 1:A:103:GLU:HG3 9 0.11 0.29 (1,845) 1:A:32:ALA:HB1 1:A:33:PRO:HD3 9 0.05 0.1 (1,845) 1:A:32:ALA:HB1 1:A:33:PRO:HD3 9 0.05 0.1 (1,845) 1:A:32:ALA:HB3 1:A:33:PRO:HD3 9 0.05 0.1 (1,845) 1:A:30:TYR:HE1 1:A:37:VAL:HG11 9 0.62 1.47 (1,820) 1:A:30:TYR:HE1 1:A:37:VAL:HG13 9 0.05 0.1 (1,820) 1:A:30:TYR:HE1 1:A:37:VAL:HG13 9 0.62 1.47 (1,733) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:36:GLN:HG2 9 0.68 1.09 (1,706) 1:A:26:ILE:HG21 1:A:28:GLN:HG2 9 0.68 1.09 (1,706) 1:A:26:ILE:HG22 1:A:16:ILE:HG22 9 0.53 1.04 (1,410) 1:A:14:ARG:HG2 1:A:16:ILE:HG23 9 0.68 1.09 (1,410) 1:A:14:ARG:HG2 1:A:16:ILE:HG23 9 0.53 1.04 (1,410) 1:A:14:ARG:HG2 1:A:16:ILE:HG23 9 0.53 1.04 (1,410) 1:A:14:ARG:HG2 1:A:16:ILE:HG23 9 0.04 0.16 (1,324) 1:A:15:	(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD13	10	0.43	0.87
1.124	(1,1684)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:90:GLU:HG2	10	1.24	2.3
(1,1220)         1:A:52:ILE:HD11         1:A:68:GLY:HA2         10         0.4         0.71           (1,1220)         1:A:52:ILE:HD12         1:A:68:GLY:HA2         10         0.4         0.71           (1,1220)         1:A:52:ILE:HD13         1:A:68:GLY:HA2         10         0.4         0.71           (1,968)         1:A:37:VAL:HG21         1:A:108:THR:HA         9         0.08         0.18           (1,968)         1:A:37:VAL:HG23         1:A:108:THR:HA         9         0.08         0.18           (1,968)         1:A:37:VAL:HG23         1:A:108:THR:HA         9         0.08         0.18           (1,939)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:37:VAL:H         9         0.3         0.52           (1,999)         1:A:35:AVAL:HG12         1:A:30:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,890)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,845)         1:A:33:ALA:HB1         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,845)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG11         9         0.62	(1,1451)	1:A:71:SER:HB2	1:A:72:GLY:H	10	0.42	0.6
(1,1220)         1:A:52:ILE:HD12         1:A:68:GLY:HA2         10         0.4         0.71           (1,1220)         1:A:52:ILE:HD13         1:A:68:GLY:HA2         10         0.4         0.71           (1,968)         1:A:37:VAL:HG21         1:A:108:THR:HA         9         0.08         0.18           (1,968)         1:A:37:VAL:HG23         1:A:108:THR:HA         9         0.08         0.18           (1,968)         1:A:37:VAL:HG23         1:A:108:THR:HA         9         0.08         0.18           (1,939)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:37:VAL:H         9         0.3         0.52           (1,999)         1:A:35:ASP:HB2         1:A:39:SER:H         9         0.13         0.37           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,845)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,845)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,845)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG11         9         0.62         1.47 <td>(1,124)</td> <td>1:A:123:VAL:N</td> <td>1:A:119:GLU:O</td> <td>10</td> <td>0.04</td> <td>0.09</td>	(1,124)	1:A:123:VAL:N	1:A:119:GLU:O	10	0.04	0.09
(1,1220)         1:A:52:ILE:HD13         1:A:68:GLY:HA2         10         0.4         0.71           (1,968)         1:A:37:VAL:HG21         1:A:108:THR:HA         9         0.08         0.18           (1,968)         1:A:37:VAL:HG22         1:A:108:THR:HA         9         0.08         0.18           (1,968)         1:A:37:VAL:HG23         1:A:108:THR:HA         9         0.08         0.18           (1,939)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:37:VAL:H         9         0.3         0.52           (1,929)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,890)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,845)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,845)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,845)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,845)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG11         9         0.62         1.47           (1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG12         9         0.62         1.47	(1,1220)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:68:GLY:HA2	10	0.4	0.71
(1,968)         1:A:37:VAL:HG21         1:A:108:THR:HA         9         0.08         0.18           (1,968)         1:A:37:VAL:HG22         1:A:108:THR:HA         9         0.08         0.18           (1,968)         1:A:37:VAL:HG23         1:A:108:THR:HA         9         0.08         0.18           (1,968)         1:A:37:VAL:HG23         1:A:108:THR:HA         9         0.08         0.18           (1,968)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:30:AEH         9         0.01         0.52           (1,929)         1:A:36:ASP:HB2         1:A:39:SER:H         9         0.11         0.29           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,845)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,845)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,845)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG11         9         0.62         1.47	(1,1220)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:68:GLY:HA2	10	0.4	0.71
(1,968)         1:A:37:VAL:HG22         1:A:108:THR:HA         9         0.08         0.18           (1,968)         1:A:37:VAL:HG23         1:A:108:THR:HA         9         0.08         0.18           (1,939)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:37:VAL:H         9         0.3         0.52           (1,890)         1:A:35:ASP:HB2         1:A:30:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:30:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,845)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,845)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG11         9         0.62         1.47           (1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG12         9         0.62         1.47           (1,706)         1:A:26:ILE:HG21         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09 <td>(1,1220)</td> <td>1:A:52:ILE:HD13</td> <td>1:A:68:GLY:HA2</td> <td>10</td> <td>0.4</td> <td>0.71</td>	(1,1220)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:68:GLY:HA2	10	0.4	0.71
(1,968)         1:A:37:VAL:HG23         1:A:108:THR:HA         9         0.08         0.18           (1,939)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:37:VAL:H         9         0.3         0.52           (1,929)         1:A:35:ASP:HB2         1:A:39:SER:H         9         0.13         0.37           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,845)         1:A:32:VAL:HB1         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,845)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG11         9         0.62         1.47           (1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG12         9         0.62         1.47           (1,870)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:30:TYR:H         9         0.62         1.47           (1,773)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:30:TYR:H         9         0.68         1.09	(1,968)	1:A:37:VAL:HG21	1:A:108:THR:HA	9	0.08	0.18
(1,939)         1:A:36:GLU:HB2         1:A:37:VAL:H         9         0.3         0.52           (1,929)         1:A:35:ASP:HB2         1:A:39:SER:H         9         0.13         0.37           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,890)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,845)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,845)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,845)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,845)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG11         9         0.62         1.47           (1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG12         9         0.62         1.47           (1,773)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:37:VAL:HG13         9         0.62         1.47           (1,706)         1:A:26:ILE:HG21         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09	(1,968)	1:A:37:VAL:HG22	1:A:108:THR:HA	9	0.08	0.18
(1,929)         1:A:35:ASP:HB2         1:A:39:SER:H         9         0.13         0.37           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,890)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,845)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,845)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,845)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG11         9         0.62         1.47           (1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG11         9         0.62         1.47           (1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG13         9         0.62         1.47           (1,733)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:30:TYR:H         9         0.6         1.3           (1,706)         1:A:26:ILE:HG21         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,706)         1:A:26:ILE:HG23         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09	(1,968)	1:A:37:VAL:HG23	1:A:108:THR:HA	9	0.08	0.18
(1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,890)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,845)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,845)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,845)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,845)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG11         9         0.62         1.47           (1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG12         9         0.62         1.47           (1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG13         9         0.62         1.47           (1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG13         9         0.62         1.47           (1,820)         1:A:26:ILE:HG21         1:A:30:TYR:H         9         0.6         1.3           (1,706)         1:A:26:ILE:HG21         1:A:30:TYR:H         9         0.68         1.09	(1,939)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:37:VAL:H	9	0.3	0.52
(1,890)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,845)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,845)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,845)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,845)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG11         9         0.62         1.47           (1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG12         9         0.62         1.47           (1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG13         9         0.62         1.47           (1,773)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:30:TYR:H         9         0.62         1.47           (1,776)         1:A:26:ILE:HG21         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,706)         1:A:26:ILE:HG22         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,410)         1:A:14:ARG:HG2         1:A:16:ILE:HG21         9         0.53         1.04 <td>(1,929)</td> <td>1:A:35:ASP:HB2</td> <td>1:A:39:SER:H</td> <td>9</td> <td>0.13</td> <td>0.37</td>	(1,929)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:39:SER:H	9	0.13	0.37
(1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         9         0.11         0.29           (1,845)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,845)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,845)         1:A:30:AYR:HB3         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG11         9         0.62         1.47           (1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG13         9         0.62         1.47           (1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG13         9         0.62         1.47           (1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:30:TYR:H         9         0.62         1.47           (1,706)         1:A:36:ILE:HG21         1:A:30:TYR:H         9         0.68         1.09	(1,890)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HG3	9	0.11	0.29
(1,845)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,845)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,845)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,845)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG11         9         0.62         1.47           (1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG12         9         0.62         1.47           (1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG13         9         0.62         1.47           (1,703)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:30:TYR:H         9         0.6         1.3           (1,706)         1:A:26:ILE:HG21         1:A:30:TYR:H         9         0.6         1.3           (1,706)         1:A:26:ILE:HG22         1:A:38:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,706)         1:A:26:ILE:HG23         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,706)         1:A:14:ARG:HG2         1:A:16:ILE:HG21         9         0.53         1.04           (1,410)         1:A:14:ARG:HG2         1:A:16:ILE:HG22         9         0.53         1.04     <	(1,890)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HG3	9	0.11	0.29
(1,845)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,845)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG11         9         0.62         1.47           (1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG13         9         0.62         1.47           (1,773)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:30:TYR:H         9         0.6         1.3           (1,706)         1:A:26:ILE:HG21         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,706)         1:A:26:ILE:HG22         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,706)         1:A:26:ILE:HG23         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,706)         1:A:4:GHG23         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,410)         1:A:14:ARG:HG2         1:A:16:ILE:HG21         9         0.53         1.04           (1,410)         1:A:14:ARG:HG2         1:A:16:ILE:HG22         9         0.53         1.04           (1,367)         1:A:13:ARG:H         1:A:16:ILE:HG23         9         0.53         1.04     <	(1,890)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HG3	9	0.11	0.29
(1,845)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:33:PRO:HD3         9         0.05         0.1           (1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG11         9         0.62         1.47           (1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG12         9         0.62         1.47           (1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG13         9         0.62         1.47           (1,773)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:30:TYR:H         9         0.6         1.3           (1,706)         1:A:26:ILE:HG21         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,706)         1:A:26:ILE:HG22         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,706)         1:A:26:ILE:HG23         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,706)         1:A:4:G:ILE:HG23         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,410)         1:A:14:ARG:HG2         1:A:16:ILE:HG21         9         0.53         1.04           (1,410)         1:A:14:ARG:HG2         1:A:16:ILE:HG22         9         0.53         1.04           (1,367)         1:A:13:ARG:HG2         1:A:16:ILE:HG23         9         0.35         1.24 </td <td>(1,845)</td> <td>1:A:32:ALA:HB1</td> <td>1:A:33:PRO:HD3</td> <td>9</td> <td>0.05</td> <td>0.1</td>	(1,845)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:33:PRO:HD3	9	0.05	0.1
(1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG11         9         0.62         1.47           (1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG12         9         0.62         1.47           (1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG13         9         0.62         1.47           (1,773)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:30:TYR:H         9         0.6         1.3           (1,706)         1:A:26:ILE:HG21         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,706)         1:A:26:ILE:HG22         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,706)         1:A:26:ILE:HG23         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,706)         1:A:26:ILE:HG23         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,706)         1:A:26:ILE:HG23         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,410)         1:A:14:ARG:HG2         1:A:16:ILE:HG21         9         0.53         1.04           (1,410)         1:A:14:ARG:HG2         1:A:16:ILE:HG22         9         0.53         1.04           (1,367)         1:A:13:ARG:HG2         1:A:16:ILE:HG23         9         0.35         1.24<	(1,845)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:33:PRO:HD3	9	0.05	0.1
(1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG12         9         0.62         1.47           (1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG13         9         0.62         1.47           (1,773)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:30:TYR:H         9         0.6         1.3           (1,706)         1:A:26:ILE:HG21         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,706)         1:A:26:ILE:HG22         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,706)         1:A:26:ILE:HG23         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,410)         1:A:14:ARG:HG2         1:A:16:ILE:HG21         9         0.53         1.04           (1,410)         1:A:14:ARG:HG2         1:A:16:ILE:HG22         9         0.53         1.04           (1,367)         1:A:13:ARG:H         1:A:16:ILE:HG23         9         0.53         1.04           (1,324)         1:A:11:LEU:HD11         1:A:177:LEU:HB2         9         0.04         0.16           (1,324)         1:A:11:LEU:HD13         1:A:177:LEU:HB2         9         0.04         0.16           (1,2562)         1:A:168:GLN:H         1:A:168:GLN:H         9         0.2         0.27 <td>(1,845)</td> <td>1:A:32:ALA:HB3</td> <td>1:A:33:PRO:HD3</td> <td>9</td> <td>0.05</td> <td>0.1</td>	(1,845)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:33:PRO:HD3	9	0.05	0.1
(1,820)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:37:VAL:HG13         9         0.62         1.47           (1,773)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:30:TYR:H         9         0.6         1.3           (1,706)         1:A:26:ILE:HG21         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,706)         1:A:26:ILE:HG22         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,706)         1:A:26:ILE:HG23         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,410)         1:A:14:ARG:HG2         1:A:16:ILE:HG21         9         0.53         1.04           (1,410)         1:A:14:ARG:HG2         1:A:16:ILE:HG22         9         0.53         1.04           (1,340)         1:A:13:ARG:HG2         1:A:16:ILE:HG23         9         0.53         1.04           (1,367)         1:A:13:ARG:HG2         1:A:16:ILE:HG23         9         0.35         1.24           (1,324)         1:A:11:LEU:HD11         1:A:177:LEU:HB2         9         0.04         0.16           (1,324)         1:A:16:ILE:HG21         1:A:168:GLN:HB2         9         0.04         0.16           (1,2562)         1:A:168:GLN:H         1:A:168:GLN:HB2         9         0.2         0.27	(1,820)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:37:VAL:HG11	9	0.62	1.47
(1,773)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:30:TYR:H         9         0.6         1.3           (1,706)         1:A:26:ILE:HG21         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,706)         1:A:26:ILE:HG22         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,706)         1:A:26:ILE:HG23         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,410)         1:A:14:ARG:HG2         1:A:16:ILE:HG21         9         0.53         1.04           (1,410)         1:A:14:ARG:HG2         1:A:16:ILE:HG22         9         0.53         1.04           (1,367)         1:A:13:ARG:HG2         1:A:16:ILE:HG23         9         0.53         1.04           (1,367)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HD2         9         0.35         1.24           (1,324)         1:A:11:LEU:HD11         1:A:177:LEU:HB2         9         0.04         0.16           (1,324)         1:A:11:LEU:HD12         1:A:177:LEU:HB2         9         0.04         0.16           (1,324)         1:A:168:GLN:H         1:A:168:GLN:HB2         9         0.04         0.16           (1,2562)         1:A:169:GLN:H         1:A:168:GLN:HB2         9         0.8         1.59 <td>(1,820)</td> <td>1:A:30:TYR:HE1</td> <td>1:A:37:VAL:HG12</td> <td>9</td> <td>0.62</td> <td>1.47</td>	(1,820)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:37:VAL:HG12	9	0.62	1.47
(1,706)         1:A:26:ILE:HG21         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,706)         1:A:26:ILE:HG22         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,706)         1:A:26:ILE:HG23         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,410)         1:A:14:ARG:HG2         1:A:16:ILE:HG21         9         0.53         1.04           (1,410)         1:A:14:ARG:HG2         1:A:16:ILE:HG22         9         0.53         1.04           (1,410)         1:A:14:ARG:HG2         1:A:16:ILE:HG23         9         0.53         1.04           (1,410)         1:A:13:ARG:H         1:A:16:ILE:HG23         9         0.53         1.04           (1,410)         1:A:14:ARG:HG2         1:A:16:ILE:HG23         9         0.35         1.04           (1,410)         1:A:15:ARG:HG2         1:A:16:ILE:HG23         9         0.35         1.	(1,820)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:37:VAL:HG13	9	0.62	1.47
(1,706)         1:A:26:ILE:HG22         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,706)         1:A:26:ILE:HG23         1:A:28:GLN:HG2         9         0.68         1.09           (1,410)         1:A:14:ARG:HG2         1:A:16:ILE:HG21         9         0.53         1.04           (1,410)         1:A:14:ARG:HG2         1:A:16:ILE:HG22         9         0.53         1.04           (1,410)         1:A:14:ARG:HG2         1:A:16:ILE:HG23         9         0.53         1.04           (1,367)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HD2         9         0.35         1.24           (1,324)         1:A:11:LEU:HD11         1:A:177:LEU:HB2         9         0.04         0.16           (1,324)         1:A:11:LEU:HD12         1:A:177:LEU:HB2         9         0.04         0.16           (1,324)         1:A:16:IC:HD13         1:A:177:LEU:HB2         9         0.04         0.16           (1,2562)         1:A:168:GLN:H         1:A:168:GLN:HB2         9         0.2         0.27           (1,2526)         1:A:169:ARG:HA         1:A:168:GLN:HG2         9         0.8         1.59           (1,2480)         1:A:161:PRO:HG2         1:A:158:GLU:H         9         0.04         0.	(1,773)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:30:TYR:H	9	0.6	1.3
(1,706)       1:A:26:ILE:HG23       1:A:28:GLN:HG2       9       0.68       1.09         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG21       9       0.53       1.04         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG22       9       0.53       1.04         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG23       9       0.53       1.04         (1,340)       1:A:13:ARG:H       1:A:13:ARG:HD2       9       0.35       1.24         (1,324)       1:A:11:LEU:HD11       1:A:177:LEU:HB2       9       0.04       0.16         (1,324)       1:A:11:LEU:HD12       1:A:177:LEU:HB2       9       0.04       0.16         (1,324)       1:A:168:GLN:H       1:A:168:GLN:HB2       9       0.04       0.16         (1,2562)       1:A:168:GLN:H       1:A:168:GLN:HB2       9       0.2       0.27         (1,2526)       1:A:165:ARG:HA       1:A:168:GLN:HG2       9       0.8       1.59         (1,2480)       1:A:161:PRO:HG2       1:A:162:GLU:H       9       0.04       0.06         (1,2446)       1:A:157:PHE:HA       1:A:158:GLU:H       9       0.04       0.08         (1,2445)       1:A:156:GLU:HA       1:A:156:GLU:HG2       9       <	(1,706)	1:A:26:ILE:HG21	1:A:28:GLN:HG2	9	0.68	1.09
(1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG21       9       0.53       1.04         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG22       9       0.53       1.04         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG23       9       0.53       1.04         (1,367)       1:A:13:ARG:H       1:A:13:ARG:HD2       9       0.35       1.24         (1,324)       1:A:11:LEU:HD11       1:A:177:LEU:HB2       9       0.04       0.16         (1,324)       1:A:11:LEU:HD12       1:A:177:LEU:HB2       9       0.04       0.16         (1,324)       1:A:16:ILE:U:HD13       1:A:177:LEU:HB2       9       0.04       0.16         (1,2562)       1:A:168:GLN:H       1:A:168:GLN:HB2       9       0.2       0.27         (1,2562)       1:A:165:ARG:HA       1:A:168:GLN:HG2       9       0.8       1.59         (1,2480)       1:A:161:PRO:HG2       1:A:162:GLU:H       9       0.39       0.47         (1,2442)       1:A:157:PHE:HA       1:A:158:GLU:H       9       0.04       0.06         (1,2445)       1:A:156:GLU:HA       1:A:156:GLU:HG2       9       0.28       0.34         (1,2432)       1:A:153:ALA:HB1       1:A:154:ALA:H       9	(1,706)	1:A:26:ILE:HG22	1:A:28:GLN:HG2	9	0.68	1.09
(1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG22       9       0.53       1.04         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG23       9       0.53       1.04         (1,367)       1:A:13:ARG:H       1:A:13:ARG:HD2       9       0.35       1.24         (1,324)       1:A:11:LEU:HD11       1:A:177:LEU:HB2       9       0.04       0.16         (1,324)       1:A:11:LEU:HD12       1:A:177:LEU:HB2       9       0.04       0.16         (1,324)       1:A:11:LEU:HD13       1:A:177:LEU:HB2       9       0.04       0.16         (1,2562)       1:A:168:GLN:H       1:A:168:GLN:HB2       9       0.2       0.27         (1,2526)       1:A:165:ARG:HA       1:A:168:GLN:HG2       9       0.8       1.59         (1,2480)       1:A:161:PRO:HG2       1:A:162:GLU:H       9       0.39       0.47         (1,2452)       1:A:157:PHE:HA       1:A:158:GLU:H       9       0.04       0.06         (1,2446)       1:A:156:GLU:HA       1:A:156:GLU:HG2       9       0.28       0.34         (1,2432)       1:A:153:ALA:HB1       1:A:154:ALA:H       9       0.13       0.21	(1,706)	1:A:26:ILE:HG23	1:A:28:GLN:HG2	9	0.68	1.09
(1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG23       9       0.53       1.04         (1,367)       1:A:13:ARG:H       1:A:13:ARG:HD2       9       0.35       1.24         (1,324)       1:A:11:LEU:HD11       1:A:177:LEU:HB2       9       0.04       0.16         (1,324)       1:A:11:LEU:HD12       1:A:177:LEU:HB2       9       0.04       0.16         (1,324)       1:A:11:LEU:HD13       1:A:177:LEU:HB2       9       0.04       0.16         (1,2562)       1:A:168:GLN:H       1:A:168:GLN:HB2       9       0.2       0.27         (1,2526)       1:A:165:ARG:HA       1:A:168:GLN:HG2       9       0.8       1.59         (1,2480)       1:A:161:PRO:HG2       1:A:162:GLU:H       9       0.39       0.47         (1,2452)       1:A:157:PHE:HA       1:A:158:GLU:H       9       0.04       0.06         (1,2446)       1:A:156:GLU:HA       1:A:156:GLU:HG2       9       0.28       0.34         (1,2432)       1:A:153:ALA:HB1       1:A:154:ALA:H       9       0.13       0.21	(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG21	9	0.53	1.04
(1,367)       1:A:13:ARG:H       1:A:13:ARG:HD2       9       0.35       1.24         (1,324)       1:A:11:LEU:HD11       1:A:177:LEU:HB2       9       0.04       0.16         (1,324)       1:A:11:LEU:HD12       1:A:177:LEU:HB2       9       0.04       0.16         (1,324)       1:A:11:LEU:HD13       1:A:177:LEU:HB2       9       0.04       0.16         (1,2562)       1:A:168:GLN:H       1:A:168:GLN:HB2       9       0.2       0.27         (1,2526)       1:A:165:ARG:HA       1:A:168:GLN:HG2       9       0.8       1.59         (1,2480)       1:A:161:PRO:HG2       1:A:162:GLU:H       9       0.39       0.47         (1,2452)       1:A:157:PHE:HA       1:A:158:GLU:H       9       0.04       0.06         (1,2446)       1:A:156:GLU:HA       1:A:157:PHE:H       9       0.28       0.34         (1,2432)       1:A:153:ALA:HB1       1:A:154:ALA:H       9       0.13       0.21	(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG22	9	0.53	1.04
(1,324)       1:A:11:LEU:HD11       1:A:177:LEU:HB2       9       0.04       0.16         (1,324)       1:A:11:LEU:HD12       1:A:177:LEU:HB2       9       0.04       0.16         (1,324)       1:A:11:LEU:HD13       1:A:177:LEU:HB2       9       0.04       0.16         (1,2562)       1:A:168:GLN:H       1:A:168:GLN:HB2       9       0.2       0.27         (1,2526)       1:A:165:ARG:HA       1:A:168:GLN:HG2       9       0.8       1.59         (1,2480)       1:A:161:PRO:HG2       1:A:162:GLU:H       9       0.39       0.47         (1,2452)       1:A:157:PHE:HA       1:A:158:GLU:H       9       0.04       0.06         (1,2446)       1:A:156:GLU:HA       1:A:156:GLU:HG2       9       0.28       0.34         (1,2432)       1:A:153:ALA:HB1       1:A:154:ALA:H       9       0.13       0.21	(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG23	9	0.53	1.04
(1,324)       1:A:11:LEU:HD12       1:A:177:LEU:HB2       9       0.04       0.16         (1,324)       1:A:11:LEU:HD13       1:A:177:LEU:HB2       9       0.04       0.16         (1,2562)       1:A:168:GLN:H       1:A:168:GLN:HB2       9       0.2       0.27         (1,2526)       1:A:165:ARG:HA       1:A:168:GLN:HG2       9       0.8       1.59         (1,2480)       1:A:161:PRO:HG2       1:A:162:GLU:H       9       0.39       0.47         (1,2452)       1:A:157:PHE:HA       1:A:158:GLU:H       9       0.04       0.06         (1,2446)       1:A:156:GLU:HA       1:A:157:PHE:H       9       0.28       0.34         (1,2432)       1:A:153:ALA:HB1       1:A:154:ALA:H       9       0.13       0.21	(1,367)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HD2	9	0.35	1.24
(1,324)       1:A:11:LEU:HD13       1:A:177:LEU:HB2       9       0.04       0.16         (1,2562)       1:A:168:GLN:H       1:A:168:GLN:HB2       9       0.2       0.27         (1,2526)       1:A:165:ARG:HA       1:A:168:GLN:HG2       9       0.8       1.59         (1,2480)       1:A:161:PRO:HG2       1:A:162:GLU:H       9       0.39       0.47         (1,2452)       1:A:157:PHE:HA       1:A:158:GLU:H       9       0.04       0.06         (1,2446)       1:A:156:GLU:HA       1:A:157:PHE:H       9       0.28       0.34         (1,2432)       1:A:153:ALA:HB1       1:A:154:ALA:H       9       0.13       0.21	(1,324)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HB2	9	0.04	0.16
(1,2562)       1:A:168:GLN:H       1:A:168:GLN:HB2       9       0.2       0.27         (1,2526)       1:A:165:ARG:HA       1:A:168:GLN:HG2       9       0.8       1.59         (1,2480)       1:A:161:PRO:HG2       1:A:162:GLU:H       9       0.39       0.47         (1,2452)       1:A:157:PHE:HA       1:A:158:GLU:H       9       0.04       0.06         (1,2446)       1:A:156:GLU:HA       1:A:157:PHE:H       9       0.04       0.08         (1,2445)       1:A:156:GLU:HA       1:A:156:GLU:HG2       9       0.28       0.34         (1,2432)       1:A:153:ALA:HB1       1:A:154:ALA:H       9       0.13       0.21	(1,324)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HB2	9	0.04	0.16
(1,2562)       1:A:168:GLN:H       1:A:168:GLN:HB2       9       0.2       0.27         (1,2526)       1:A:165:ARG:HA       1:A:168:GLN:HG2       9       0.8       1.59         (1,2480)       1:A:161:PRO:HG2       1:A:162:GLU:H       9       0.39       0.47         (1,2452)       1:A:157:PHE:HA       1:A:158:GLU:H       9       0.04       0.06         (1,2446)       1:A:156:GLU:HA       1:A:157:PHE:H       9       0.04       0.08         (1,2445)       1:A:156:GLU:HA       1:A:156:GLU:HG2       9       0.28       0.34         (1,2432)       1:A:153:ALA:HB1       1:A:154:ALA:H       9       0.13       0.21	_ ` /	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HB2	9	0.04	0.16
(1,2480)       1:A:161:PRO:HG2       1:A:162:GLU:H       9       0.39       0.47         (1,2452)       1:A:157:PHE:HA       1:A:158:GLU:H       9       0.04       0.06         (1,2446)       1:A:156:GLU:HA       1:A:157:PHE:H       9       0.04       0.08         (1,2445)       1:A:156:GLU:HA       1:A:156:GLU:HG2       9       0.28       0.34         (1,2432)       1:A:153:ALA:HB1       1:A:154:ALA:H       9       0.13       0.21		1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HB2	9	0.2	0.27
(1,2452)       1:A:157:PHE:HA       1:A:158:GLU:H       9       0.04       0.06         (1,2446)       1:A:156:GLU:HA       1:A:157:PHE:H       9       0.04       0.08         (1,2445)       1:A:156:GLU:HA       1:A:156:GLU:HG2       9       0.28       0.34         (1,2432)       1:A:153:ALA:HB1       1:A:154:ALA:H       9       0.13       0.21	(1,2526)	1:A:165:ARG:HA	1:A:168:GLN:HG2	9	0.8	1.59
(1,2446)       1:A:156:GLU:HA       1:A:157:PHE:H       9       0.04       0.08         (1,2445)       1:A:156:GLU:HA       1:A:156:GLU:HG2       9       0.28       0.34         (1,2432)       1:A:153:ALA:HB1       1:A:154:ALA:H       9       0.13       0.21	(1,2480)	1:A:161:PRO:HG2	1:A:162:GLU:H	9	0.39	0.47
(1,2445)       1:A:156:GLU:HA       1:A:156:GLU:HG2       9       0.28       0.34         (1,2432)       1:A:153:ALA:HB1       1:A:154:ALA:H       9       0.13       0.21	(1,2452)	1:A:157:PHE:HA	1:A:158:GLU:H	9	0.04	0.06
(1,2432) 1:A:153:ALA:HB1 1:A:154:ALA:H 9 0.13 0.21	(1,2446)	1:A:156:GLU:HA	1:A:157:PHE:H	9	0.04	0.08
	(1,2445)	1:A:156:GLU:HA	1:A:156:GLU:HG2	9	0.28	0.34
(1.2432) 1:A:153:ALA:HB2 1:A:154:ALA:H 9 0.13 0.21	(1,2432)	1:A:153:ALA:HB1	1:A:154:ALA:H	9	0.13	0.21
(-,)	(1,2432)	1:A:153:ALA:HB2	1:A:154:ALA:H	9	0.13	0.21



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB3	1:A:154:ALA:H	9	0.13	0.21
(1,2421)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:H	9	0.63	1.09
(1,2364)	1:A:142:GLY:H	1:A:144:LEU:HB2	9	0.4	1.49
(1,2330)	1:A:139:PHE:HB2	1:A:141:ARG:H	9	0.34	0.62
(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB1	9	0.37	0.52
(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB2	9	0.37	0.52
(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB3	9	0.37	0.52
(1,1848)	1:A:103:GLU:HG3	1:A:104:GLU:H	9	0.11	0.21
(1,1786)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:111:GLU:H	9	0.72	1.15
(1,1786)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:111:GLU:H	9	0.72	1.15
(1,1786)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:111:GLU:H	9	0.72	1.15
(1,1781)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:100:ARG:H	9	1.16	1.35
(1,1781)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:100:ARG:H	9	1.16	1.35
(1,1781)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:100:ARG:H	9	1.16	1.35
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD11	9	0.28	0.34
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD12	9	0.28	0.34
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD13	9	0.28	0.34
(1,1718)	1:A:92:LYS:HG2	1:A:93:PRO:HD2	9	0.33	0.55
(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD11	9	0.64	1.6
(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD12	9	0.64	1.6
(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD13	9	0.64	1.6
(1,1518)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:84:THR:H	9	0.54	0.92
(1,1443)	1:A:71:SER:H	1:A:87:TRP:HA	9	0.08	0.13
(1,13)	1:A:21:ALA:H	1:A:14:ARG:O	9	0.08	0.18
(1,1274)	1:A:55:LYS:HG2	1:A:55:LYS:HE2	9	0.26	0.33
(1,115)	1:A:114:HIS:H	1:A:24:ILE:O	9	0.05	0.12
(1,906)	1:A:34:VAL:HG21	1:A:102:SER:HA	8	0.06	0.2
(1,906)	1:A:34:VAL:HG22	1:A:102:SER:HA	8	0.06	0.2
(1,906)	1:A:34:VAL:HG23	1:A:102:SER:HA	8	0.06	0.2
(1,867)	1:A:34:VAL:H	1:A:103:GLU:HA	8	0.06	0.1
(1,848)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:H	8	0.08	0.15
(1,848)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:H	8	0.08	0.15
(1,848)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:H	8	0.08	0.15
(1,808)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:31:ASP:H	8	0.8	1.04
(1,807)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HG21	8	0.79	1.54
(1,807)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HG22	8	0.79	1.54
(1,807)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HG23	8	0.79	1.54
(1,805)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:137:GLY:HA2	8	1.02	1.36
(1,721)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:111:GLU:HG2	8	0.04	0.06
(1,689)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:28:GLN:HE22	8	0.07	0.14
(1,689)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:28:GLN:HE22	8	0.07	0.14
(1,689)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:28:GLN:HE22	8	0.07	0.14



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,55)	1:A:58:LEU:H	1:A:63:ASN:O	8	0.06	0.1
(1,527)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:22:ARG:HD2	8	0.21	0.26
(1,399)	1:A:14:ARG:HE	1:A:15:THR:H	8	0.15	0.24
(1,383)	1:A:13:ARG:HG2	1:A:14:ARG:HA	8	0.47	0.84
(1,335)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:22:ARG:HD2	8	0.47	0.9
(1,335)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:22:ARG:HD2	8	0.47	0.9
(1,335)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:22:ARG:HD2	8	0.47	0.9
(1,2654)	1:A:176:ALA:H	1:A:177:LEU:HB2	8	0.17	0.24
(1,2651)	1:A:175:ALA:HB1	1:A:179:HIS:HD2	8	0.04	0.08
(1,2651)	1:A:175:ALA:HB2	1:A:179:HIS:HD2	8	0.04	0.08
(1,2651)	1:A:175:ALA:HB3	1:A:179:HIS:HD2	8	0.04	0.08
(1,2594)	1:A:172:GLU:H	1:A:172:GLU:HG2	8	0.34	0.92
(1,2563)	1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HE21	8	0.33	0.58
(1,2557)	1:A:166:ILE:HG21	1:A:167:SER:HB2	8	0.1	0.22
(1,2557)	1:A:166:ILE:HG22	1:A:167:SER:HB2	8	0.1	0.22
(1,2557)	1:A:166:ILE:HG23	1:A:167:SER:HB2	8	0.1	0.22
(1,2462)	1:A:158:GLU:HG2	1:A:159:PRO:HD2	8	0.7	1.18
(1,2456)	1:A:158:GLU:H	1:A:159:PRO:HD2	8	0.27	0.54
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB1	1:A:155:GLU:H	8	0.11	0.22
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB2	1:A:155:GLU:H	8	0.11	0.22
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB3	1:A:155:GLU:H	8	0.11	0.22
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB1	8	0.83	1.44
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB2	8	0.83	1.44
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB3	8	0.83	1.44
(1,2410)	1:A:150:PRO:HB2	1:A:151:GLU:H	8	0.21	0.58
(1,2386)	1:A:147:GLY:H	1:A:148:PRO:HD2	8	0.2	0.4
(1,2362)	1:A:141:ARG:HG2	1:A:142:GLY:H	8	0.34	0.94
(1,2050)	1:A:120:GLN:HB2	1:A:121:MET:H	8	0.11	0.19
(1,2024)	1:A:118:SER:HB2	1:A:122:LEU:H	8	0.6	0.76
(1,1867)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:H	8	0.47	1.15
(1,1835)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:H	8	0.41	0.74
(1,1731)	1:A:96:GLU:H	1:A:114:HIS:HD2	8	0.05	0.12
(1,1722)	1:A:94:ASP:H	1:A:94:ASP:HB2	8	0.16	0.36
(1,1703)	1:A:90:GLU:HG2	1:A:91:GLY:H	8	0.21	0.35
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD21	8	0.84	1.56
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD22	8	0.84	1.56
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD23	8	0.84	1.56
(1,1452)	1:A:71:SER:HB2	1:A:88:VAL:HB	8	0.32	0.68
(1,1426)	1:A:70:ALA:H	1:A:89:TYR:HD1	8	1.03	2.44
(1,141)	1:A:132:ALA:H	1:A:128:GLY:O	8	0.04	0.08
(1,1388)	1:A:66:LEU:H	1:A:71:SER:HB2	8	0.57	1.05
(1,138)	1:A:130:GLU:N	1:A:126:GLY:O	8	0.04	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1345)	1:A:63:ASN:HA	1:A:74:ILE:HG12	8	0.66	0.92
(1,1342)	1:A:63:ASN:HA	1:A:73:ASP:HA	8	0.04	0.1
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD11	8	0.11	0.26
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD12	8	0.11	0.26
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD13	8	0.11	0.26
(1,131)	1:A:127:VAL:H	1:A:123:VAL:O	8	0.07	0.15
(1,1299)	1:A:58:LEU:H	1:A:59:ARG:HG2	8	0.47	1.18
(1,1275)	1:A:55:LYS:HG2	1:A:56:GLY:H	8	0.23	0.42
(1,1182)	1:A:50:TRP:HH2	1:A:136:LEU:HB2	8	0.35	0.44
(1,1171)	1:A:50:TRP:HE1	1:A:136:LEU:HG	8	0.12	0.18
(1,1151)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HA	8	0.52	0.86
(1,1113)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HZ	8	0.54	1.33
(1,1072)	1:A:43:ASP:HB2	1:A:46:ARG:HG2	8	0.96	1.8
(1,1024)	1:A:39:SER:HB2	1:A:46:ARG:HD2	8	0.78	1.54
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD11	8	0.05	0.11
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD12	8	0.05	0.11
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD13	8	0.05	0.11
(1,935)	1:A:36:GLU:HA	1:A:36:GLU:HG2	7	0.34	0.4
(1,888)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HA	7	0.16	0.41
(1,888)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HA	7	0.16	0.41
(1,888)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HA	7	0.16	0.41
(1,767)	1:A:29:ARG:HE	1:A:104:GLU:HG2	7	0.3	0.65
(1,766)	1:A:29:ARG:HE	1:A:104:GLU:HB2	7	0.45	0.9
(1,746)	1:A:28:GLN:HG3	1:A:29:ARG:H	7	0.1	0.19
(1,56)	1:A:58:LEU:N	1:A:63:ASN:O	7	0.04	0.08
(1,459)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:19:GLY:H	7	0.23	0.43
(1,333)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:181:GLY:HA2	7	0.64	1.58
(1,333)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:181:GLY:HA2	7	0.64	1.58
(1,333)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:181:GLY:HA2	7	0.64	1.58
(1,2714)	1:A:181:GLY:HA2	1:A:182:SER:H	7	0.04	0.05
(1,2591)	1:A:171:GLY:H	1:A:172:GLU:HG2	7	0.61	1.01
(1,2578)	1:A:169:GLU:HA	1:A:172:GLU:HG2	7	0.91	1.33
(1,2571)	1:A:168:GLN:HB2	1:A:169:GLU:H	7	0.37	0.52
(1,2570)	1:A:168:GLN:HB2	1:A:168:GLN:HE22	7	0.23	0.4
(1,2530)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:168:GLN:HG2	7	0.75	1.43
(1,2457)	1:A:158:GLU:HA	1:A:158:GLU:HG2	7	0.36	0.8
(1,2449)	1:A:157:PHE:H	1:A:157:PHE:HB2	7	0.13	0.18
(1,2441)	1:A:155:GLU:HA	1:A:155:GLU:HG2	7	0.34	0.78
(1,2431)	1:A:153:ALA:HA	1:A:154:ALA:H	7	0.05	0.06
(1,2413)	1:A:150:PRO:HG2	1:A:152:ASP:H	7	0.25	0.35
(1,2378)	1:A:144:LEU:HA	1:A:144:LEU:HD11	7	0.37	0.44
(1,2378)	1:A:144:LEU:HA	1:A:144:LEU:HD12	7	0.37	0.44



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,2378)	1:A:144:LEU:HA	1:A:144:LEU:HD13	7	0.37	0.44
(1,2365)	1:A:143:ASP:H	1:A:143:ASP:HB2	7	0.14	0.27
(1,235)	1:A:8:GLU:HB3	1:A:27:ARG:H	7	0.04	0.08
(1,2232)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:H	7	0.1	0.19
(1,217)	1:A:7:THR:HG21	1:A:27:ARG:HB2	7	0.3	0.88
(1,217)	1:A:7:THR:HG22	1:A:27:ARG:HB2	7	0.3	0.88
(1,217)	1:A:7:THR:HG23	1:A:27:ARG:HB2	7	0.3	0.88
(1,1891)	1:A:108:THR:HG1	1:A:109:LEU:H	7	0.03	0.1
(1,185)	1:A:176:ALA:H	1:A:172:GLU:O	7	0.06	0.12
(1,1790)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:113:GLU:H	7	0.29	0.57
(1,1790)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:113:GLU:H	7	0.29	0.57
(1,1790)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:113:GLU:H	7	0.29	0.57
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HD21	7	0.43	1.27
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HD22	7	0.43	1.27
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HD23	7	0.43	1.27
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HD21	7	0.43	1.27
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HD22	7	0.43	1.27
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HD23	7	0.43	1.27
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HD21	7	0.43	1.27
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HD22	7	0.43	1.27
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HD23	7	0.43	1.27
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HG	7	0.18	0.41
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HG	7	0.18	0.41
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HG	7	0.18	0.41
(1,1706)	1:A:92:LYS:H	1:A:92:LYS:HD2	7	0.17	0.34
(1,163)	1:A:165:ARG:H	1:A:161:PRO:O	7	0.06	0.12
(1,16)	1:A:22:ARG:N	1:A:116:THR:O	7	0.04	0.06
(1,159)	1:A:141:ARG:H	1:A:137:GLY:O	7	0.04	0.07
(1,1532)	1:A:78:GLU:H	1:A:81:ARG:HB2	7	0.43	0.89
(1,1507)	1:A:75:LEU:HD21	1:A:86:SER:HB2	7	0.27	0.75
(1,1507)	1:A:75:LEU:HD22	1:A:86:SER:HB2	7	0.27	0.75
(1,1507)	1:A:75:LEU:HD23	1:A:86:SER:HB2	7	0.27	0.75
(1,1381)	1:A:65:ALA:HB1	1:A:71:SER:HB2	7	0.81	1.45
(1,1381)	1:A:65:ALA:HB2	1:A:71:SER:HB2	7	0.81	1.45
(1,1381)	1:A:65:ALA:HB3	1:A:71:SER:HB2	7	0.81	1.45
(1,125)	1:A:124:GLU:H	1:A:120:GLN:O	7	0.04	0.13
(1,1088)	1:A:44:PRO:HG2	1:A:45:ASN:HB2	7	0.87	1.01
(1,1069)	1:A:43:ASP:HB2	1:A:45:ASN:H	7	0.17	0.46
(1,1054)	1:A:41:CYS:H	1:A:99:LEU:HD11	7	0.44	1.01
(1,1054)	1:A:41:CYS:H	1:A:99:LEU:HD12	7	0.44	1.01
(1,1054)	1:A:41:CYS:H	1:A:99:LEU:HD13	7	0.44	1.01
(1,1030)	1:A:40:ALA:H	1:A:46:ARG:HD2	7	0.6	1.09



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,893)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:H	6	0.04	0.07
(1,893)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:H	6	0.04	0.07
(1,893)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:H	6	0.04	0.07
(1,889)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HG2	6	0.08	0.15
(1,889)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HG2	6	0.08	0.15
(1,889)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HG2	6	0.08	0.15
(1,850)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:HG2	6	0.43	0.98
(1,850)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:HG2	6	0.43	0.98
(1,850)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:HG2	6	0.43	0.98
(1,814)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD11	6	0.23	0.28
(1,814)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD12	6	0.23	0.28
(1,814)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD13	6	0.23	0.28
(1,781)	1:A:30:TYR:HA	1:A:30:TYR:HD1	6	0.4	0.56
(1,753)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD21	6	0.07	0.11
(1,753)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD22	6	0.07	0.11
(1,753)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD23	6	0.07	0.11
(1,748)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HD11	6	0.33	0.57
(1,748)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HD12	6	0.33	0.57
(1,748)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HD13	6	0.33	0.57
(1,742)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD21	6	0.07	0.11
(1,742)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD22	6	0.07	0.11
(1,742)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD23	6	0.07	0.11
(1,635)	1:A:25:ILE:HG12	1:A:113:GLU:HA	6	0.17	0.32
(1,63)	1:A:65:ALA:H	1:A:55:LYS:O	6	0.11	0.19
(1,51)	1:A:51:PHE:H	1:A:47:ILE:O	6	0.22	0.25
(1,323)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:12:GLY:H	6	0.03	0.06
(1,323)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:12:GLY:H	6	0.03	0.06
(1,323)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:12:GLY:H	6	0.03	0.06
(1,272)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:174:TRP:HH2	6	0.8	0.97
(1,2659)	1:A:176:ALA:HA	1:A:179:HIS:HB3	6	0.07	0.2
(1,2550)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:170:ARG:HG2	6	0.32	0.9
(1,2550)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:170:ARG:HG2	6	0.32	0.9
(1,2550)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:170:ARG:HG2	6	0.32	0.9
(1,2532)	1:A:165:ARG:HG2	1:A:169:GLU:HG2	6	0.64	1.17
(1,2439)	1:A:155:GLU:H	1:A:155:GLU:HB2	6	0.18	0.4
(1,2381)	1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:PRO:HD2	6	0.38	0.91
(1,2381)	1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:PRO:HD2	6	0.38	0.91
(1,2381)	1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:PRO:HD2	6	0.38	0.91
(1,2380)	1:A:144:LEU:HB2	1:A:145:PRO:HD2	6	0.22	0.45
(1,2375)	1:A:144:LEU:H	1:A:145:PRO:HD2	6	0.32	0.46
, , = /					
(1,2367)	1:A:143:ASP:H	1:A:144:LEU:HB2	6	0.48	1.71



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,219)	1:A:7:THR:HG21	1:A:28:GLN:HG2	6	0.25	0.62
(1,219)	1:A:7:THR:HG22	1:A:28:GLN:HG2	6	0.25	0.62
(1,219)	1:A:7:THR:HG23	1:A:28:GLN:HG2	6	0.25	0.62
(1,2178)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:131:MET:HG2	6	0.62	1.03
(1,2178)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:131:MET:HG2	6	0.62	1.03
(1,2178)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:131:MET:HG2	6	0.62	1.03
(1,2116)	1:A:123:VAL:HG11	1:A:175:ALA:HA	6	0.03	0.06
(1,2116)	1:A:123:VAL:HG12	1:A:175:ALA:HA	6	0.03	0.06
(1,2116)	1:A:123:VAL:HG13	1:A:175:ALA:HA	6	0.03	0.06
(1,2102)	1:A:123:VAL:HA	1:A:178:VAL:H	6	0.13	0.2
(1,194)	1:A:5:GLN:H	1:A:5:GLN:HG2	6	0.41	0.83
(1,1869)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:HD21	6	0.46	1.13
(1,1869)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:HD22	6	0.46	1.13
(1,1869)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:HD23	6	0.46	1.13
(1,1856)	1:A:104:GLU:HA	1:A:104:GLU:HG2	6	0.3	0.34
(1,175)	1:A:171:GLY:H	1:A:167:SER:O	6	0.07	0.17
(1,1681)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:HG2	6	0.47	1.36
(1,1674)	1:A:89:TYR:HA	1:A:90:GLU:HB2	6	0.62	0.96
(1,1653)	1:A:87:TRP:HB2	1:A:95:SER:H	6	0.27	0.55
(1,1648)	1:A:87:TRP:HE1	1:A:89:TYR:HD1	6	0.49	0.77
(1,1621)	1:A:85:ILE:HD11	1:A:99:LEU:HB2	6	0.25	0.43
(1,1621)	1:A:85:ILE:HD12	1:A:99:LEU:HB2	6	0.25	0.43
(1,1621)	1:A:85:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HB2	6	0.25	0.43
(1,1610)	1:A:85:ILE:H	1:A:98:GLU:HB2	6	0.4	0.89
(1,1568)	1:A:82:ARG:HB2	1:A:82:ARG:HD2	6	0.28	0.4
(1,1556)	1:A:81:ARG:HB2	1:A:81:ARG:HD2	6	0.29	0.33
(1,1517)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HD2	6	0.32	0.76
(1,145)	1:A:134:ASP:H	1:A:130:GLU:O	6	0.05	0.09
(1,1420)	1:A:69:ASN:HA	1:A:89:TYR:HE1	6	0.77	1.53
(1,1407)	1:A:67:GLN:HA	1:A:68:GLY:H	6	0.05	0.07
(1,1406)	1:A:67:GLN:HA	1:A:67:GLN:HG2	6	0.27	0.36
(1,1238)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:67:GLN:HG2	6	0.46	0.98
(1,1238)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:67:GLN:HG2	6	0.46	0.98
(1,1238)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:67:GLN:HG2	6	0.46	0.98
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:66:LEU:HA	6	0.17	0.23
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:66:LEU:HA	6	0.17	0.23
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:66:LEU:HA	6	0.17	0.23
(1,1205)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:52:ILE:H	6	0.62	1.08
(1,1152)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HB2	6	0.56	1.1
(1,1056)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:42:THR:HG21	6	0.74	0.96
(1,1056)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:42:THR:HG22	6	0.74	0.96
(1,1056)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:42:THR:HG23	6	0.74	0.96



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,980)	1:A:38:TRP:H	1:A:39:SER:HB2	5	0.59	1.31
(1,976)	1:A:38:TRP:H	1:A:108:THR:HG21	5	0.09	0.13
(1,976)	1:A:38:TRP:H	1:A:108:THR:HG22	5	0.09	0.13
(1,976)	1:A:38:TRP:H	1:A:108:THR:HG23	5	0.09	0.13
(1,904)	1:A:34:VAL:HG21	1:A:101:LEU:H	5	0.08	0.13
(1,904)	1:A:34:VAL:HG22	1:A:101:LEU:H	5	0.08	0.13
(1,904)	1:A:34:VAL:HG23	1:A:101:LEU:H	5	0.08	0.13
(1,9)	1:A:16:ILE:H	1:A:19:GLY:O	5	0.06	0.11
(1,896)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:36:GLU:H	5	0.08	0.09
(1,896)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:36:GLU:H	5	0.08	0.09
(1,896)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:36:GLU:H	5	0.08	0.09
(1,87)	1:A:95:SER:H	1:A:87:TRP:O	5	0.1	0.15
(1,821)	1:A:31:ASP:H	1:A:140:ILE:HG21	5	0.04	0.05
(1,821)	1:A:31:ASP:H	1:A:140:ILE:HG22	5	0.04	0.05
(1,821)	1:A:31:ASP:H	1:A:140:ILE:HG23	5	0.04	0.05
(1,819)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:140:ILE:HD11	5	0.65	1.14
(1,819)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:140:ILE:HD12	5	0.65	1.14
(1,819)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:140:ILE:HD13	5	0.65	1.14
(1,806)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HD11	5	0.41	0.65
(1,806)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HD12	5	0.41	0.65
(1,806)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HD13	5	0.41	0.65
(1,75)	1:A:82:ARG:H	1:A:78:GLU:O	5	0.05	0.09
(1,65)	1:A:71:SER:H	1:A:88:VAL:O	5	0.04	0.05
(1,496)	1:A:20:GLU:HG2	1:A:21:ALA:H	5	0.43	0.85
(1,47)	1:A:47:ILE:H	1:A:43:ASP:O	5	0.08	0.12
(1,446)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HG21	5	0.1	0.23
(1,446)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HG22	5	0.1	0.23
(1,446)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HG23	5	0.1	0.23
(1,446)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HG21	5	0.1	0.23
(1,446)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HG22	5	0.1	0.23
(1,446)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HG23	5	0.1	0.23
(1,446)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HG21	5	0.1	0.23
(1,446)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HG22	5	0.1	0.23
(1,446)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HG23	5	0.1	0.23
(1,362)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:23:SER:HG	5	0.87	1.44
(1,2710)	1:A:180:SER:H	1:A:180:SER:HB2	5	0.19	0.46
(1,271)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:174:TRP:HE1	5	0.3	0.57
(1,2706)	1:A:179:HIS:H	1:A:180:SER:HB2	5	0.1	0.19
(1,2644)	1:A:175:ALA:HA	1:A:178:VAL:HG21	5	0.04	0.09
(1,2644)	1:A:175:ALA:HA	1:A:178:VAL:HG22	5	0.04	0.09
(1,2644)	1:A:175:ALA:HA	1:A:178:VAL:HG23	5	0.04	0.09
(1,2599)	1:A:172:GLU:HA	1:A:172:GLU:HG2	5	0.34	0.5



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,255)	1:A:9:ARG:HE	1:A:130:GLU:HG2	5	0.82	1.44
(1,2524)	1:A:165:ARG:HA	1:A:168:GLN:HB2	5	0.27	0.78
(1,2469)	1:A:160:SER:HA	1:A:163:MET:H	5	0.05	0.09
(1,2454)	1:A:158:GLU:H	1:A:158:GLU:HB2	5	0.24	0.45
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB1	1:A:156:GLU:H	5	0.19	0.32
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB2	1:A:156:GLU:H	5	0.19	0.32
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB3	1:A:156:GLU:H	5	0.19	0.32
(1,241)	1:A:8:GLU:HG2	1:A:9:ARG:H	5	0.49	0.76
(1,2400)	1:A:149:VAL:HB	1:A:150:PRO:HD2	5	0.23	0.48
(1,2389)	1:A:147:GLY:HA2	1:A:148:PRO:HG2	5	0.58	1.15
(1,2385)	1:A:146:GLY:HA2	1:A:147:GLY:H	5	0.04	0.07
(1,2358)	1:A:141:ARG:HA	1:A:141:ARG:HG2	5	0.32	0.38
(1,2352)	1:A:141:ARG:H	1:A:141:ARG:HD2	5	0.2	0.69
(1,2350)	1:A:140:ILE:HG21	1:A:141:ARG:HG2	5	0.5	0.88
(1,2350)	1:A:140:ILE:HG22	1:A:141:ARG:HG2	5	0.5	0.88
(1,2350)	1:A:140:ILE:HG23	1:A:141:ARG:HG2	5	0.5	0.88
(1,2335)	1:A:139:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HG	5	0.06	0.11
(1,2335)	1:A:139:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HG	5	0.06	0.11
(1,2313)	1:A:138:MET:HE1	1:A:143:ASP:HB2	5	0.08	0.13
(1,2313)	1:A:138:MET:HE2	1:A:143:ASP:HB2	5	0.08	0.13
(1,2313)	1:A:138:MET:HE3	1:A:143:ASP:HB2	5	0.08	0.13
(1,2276)	1:A:135:PHE:HE1	1:A:138:MET:HE1	5	0.21	0.74
(1,2276)	1:A:135:PHE:HE1	1:A:138:MET:HE2	5	0.21	0.74
(1,2276)	1:A:135:PHE:HE1	1:A:138:MET:HE3	5	0.21	0.74
(1,2230)	1:A:131:MET:HE1	1:A:167:SER:HB2	5	0.63	1.65
(1,2230)	1:A:131:MET:HE2	1:A:167:SER:HB2	5	0.63	1.65
(1,2230)	1:A:131:MET:HE3	1:A:167:SER:HB2	5	0.63	1.65
(1,2221)	1:A:130:GLU:HG2	1:A:174:TRP:HZ2	5	0.2	0.5
(1,2184)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:174:TRP:HD1	5	0.07	0.1
(1,2184)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:174:TRP:HD1	5	0.07	0.1
(1,2184)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:174:TRP:HD1	5	0.07	0.1
(1,2139)	1:A:124:GLU:HG2	1:A:125:VAL:HA	5	0.35	0.61
(1,2131)	1:A:124:GLU:HA	1:A:124:GLU:HG2	5	0.34	0.37
(1,2068)	1:A:121:MET:HG2	1:A:125:VAL:HG11	5	0.52	0.81
(1,2068)	1:A:121:MET:HG2	1:A:125:VAL:HG12	5	0.52	0.81
(1,2068)	1:A:121:MET:HG2	1:A:125:VAL:HG13	5	0.52	0.81
(1,2047)	1:A:120:GLN:HA	1:A:120:GLN:HE21	5	0.19	0.3
(1,2042)	1:A:119:GLU:HG2	1:A:178:VAL:HG11	5	0.17	0.33
(1,2042)	1:A:119:GLU:HG2	1:A:178:VAL:HG12	5	0.17	0.33
(1,2042)	1:A:119:GLU:HG2	1:A:178:VAL:HG13	5	0.17	0.33
(1,2016)	1:A:118:SER:H	1:A:121:MET:HB2	5	0.08	0.19
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:133:LEU:HD11	5	0.05	0.11



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:133:LEU:HD12	5	0.05	0.11
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:133:LEU:HD13	5	0.05	0.11
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:133:LEU:HD11	5	0.05	0.11
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:133:LEU:HD12	5	0.05	0.11
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:133:LEU:HD13	5	0.05	0.11
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HD11	5	0.05	0.11
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HD12	5	0.05	0.11
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HD13	5	0.05	0.11
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HD21	5	0.06	0.1
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HD22	5	0.06	0.1
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HD23	5	0.06	0.1
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HD21	5	0.06	0.1
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HD22	5	0.06	0.1
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HD23	5	0.06	0.1
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HD21	5	0.06	0.1
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HD22	5	0.06	0.1
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HD23	5	0.06	0.1
(1,1861)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:108:THR:H	5	0.61	0.93
(1,1815)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:102:SER:HB2	5	0.09	0.16
(1,1815)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:102:SER:HB2	5	0.09	0.16
(1,1815)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:102:SER:HB2	5	0.09	0.16
(1,181)	1:A:174:TRP:H	1:A:170:ARG:O	5	0.05	0.15
(1,180)	1:A:173:ALA:N	1:A:169:GLU:O	5	0.04	0.06
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD21	5	0.06	0.14
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD22	5	0.06	0.14
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD23	5	0.06	0.14
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD21	5	0.06	0.14
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD22	5	0.06	0.14
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD23	5	0.06	0.14
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD21	5	0.06	0.14
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD22	5	0.06	0.14
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD23	5	0.06	0.14
(1,1714)	1:A:92:LYS:HD2	1:A:93:PRO:HD2	5	0.75	1.54
(1,1697)	1:A:90:GLU:HA	1:A:91:GLY:H	5	0.05	0.11
(1,1575)	1:A:83:LEU:H	1:A:99:LEU:HB2	5	0.11	0.2
(1,1570)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:83:LEU:H	5	0.09	0.24
(1,1563)	1:A:82:ARG:HA	1:A:82:ARG:HD2	5	0.33	0.63
(1,1449)	1:A:71:SER:H	1:A:89:TYR:HD1	5	1.24	1.63
(1,1430)	1:A:70:ALA:HA	1:A:89:TYR:HE1	5	0.54	1.1
(1,1319)	1:A:59:ARG:HG2	1:A:59:ARG:HE	5	0.17	0.4
(1,1239)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:68:GLY:H	5	0.07	0.16
(1,1239)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:68:GLY:H	5	0.07	0.16



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1239)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:68:GLY:H	5	0.07	0.16
(1,1237)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:67:GLN:HB2	5	0.63	0.73
(1,1237)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:67:GLN:HB2	5	0.63	0.73
(1,1237)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:67:GLN:HB2	5	0.63	0.73
(1,1236)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:67:GLN:H	5	0.08	0.22
(1,1236)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:67:GLN:H	5	0.08	0.22
(1,1236)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:67:GLN:H	5	0.08	0.22
(1,1226)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:69:ASN:HD21	5	0.35	1.14
(1,1226)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:69:ASN:HD21	5	0.35	1.14
(1,1226)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:69:ASN:HD21	5	0.35	1.14
(1,1203)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:129:TRP:HZ3	5	0.55	1.69
(1,1118)	1:A:46:ARG:HD2	1:A:139:PHE:HZ	5	0.95	1.55
(1,1109)	1:A:46:ARG:HA	1:A:49:ARG:HD2	5	0.36	0.96
(1,1033)	1:A:40:ALA:HA	1:A:46:ARG:HB3	5	0.04	0.07
(1,996)	1:A:38:TRP:HD1	1:A:80:PRO:HB2	4	0.46	1.03
(1,988)	1:A:38:TRP:HA	1:A:99:LEU:HD11	4	0.37	0.76
(1,988)	1:A:38:TRP:HA	1:A:99:LEU:HD12	4	0.37	0.76
(1,988)	1:A:38:TRP:HA	1:A:99:LEU:HD13	4	0.37	0.76
(1,919)	1:A:35:ASP:H	1:A:35:ASP:HB2	4	0.14	0.19
(1,899)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:38:TRP:HD1	4	0.11	0.19
(1,899)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:38:TRP:HD1	4	0.11	0.19
(1,899)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:38:TRP:HD1	4	0.11	0.19
(1,85)	1:A:87:TRP:H	1:A:95:SER:O	4	0.06	0.1
(1,822)	1:A:31:ASP:H	1:A:31:ASP:HB2	4	0.16	0.22
(1,816)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:133:LEU:HD11	4	0.59	1.29
(1,816)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:133:LEU:HD12	4	0.59	1.29
(1,816)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:133:LEU:HD13	4	0.59	1.29
(1,756)	1:A:29:ARG:H	1:A:29:ARG:HD2	4	0.05	0.08
(1,752)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD11	4	0.33	0.8
(1,752)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD12	4	0.33	0.8
(1,752)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD13	4	0.33	0.8
(1,71)	1:A:76:ARG:H	1:A:84:THR:O	4	0.05	0.09
(1,642)	1:A:25:ILE:HG21	1:A:113:GLU:HB2	4	0.62	1.06
(1,642)	1:A:25:ILE:HG22	1:A:113:GLU:HB2	4	0.62	1.06
(1,642)	1:A:25:ILE:HG23	1:A:113:GLU:HB2	4	0.62	1.06
(1,580)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:125:VAL:HG21	4	0.05	0.06
(1,580)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:125:VAL:HG22	4	0.05	0.06
(1,580)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:125:VAL:HG23	4	0.05	0.06
(1,559)	1:A:24:ILE:H	1:A:113:GLU:HG2	4	0.7	1.31
(1,551)	1:A:23:SER:HB3	1:A:113:GLU:HG2	4	0.32	0.57
(1,408)	1:A:14:ARG:HD2	1:A:16:ILE:HG21	4	0.24	0.38
(1,408)	1:A:14:ARG:HD2	1:A:16:ILE:HG22	4	0.24	0.38



Continued from previous page...

(1,408)         1:A:14:ARG:HD2         1:A:16:IE:HC23         4         0.24         0.38           (1,407)         1:A:14:ARG:HD2         1:A:15:TIR:II         4         0.61         0.71           (1,404)         1:A:14:ARG:HB2         1         0.18         0.27           (1,39)         1:A:40:ALA:H         1:A:36:GLU:O         4         0.07         0.16           (1,331)         1:A:11:LEU:HD11         1:A:180:SER:H         4         0.13         0.22           (1,331)         1:A:11:LEU:HD12         1:A:180:SER:H         4         0.13         0.22           (1,301)         1:A:29:ARG:N         1:A:68-ALA:O         4         0.05         0.11           (1,2685)         1:A:177:LEU:HD22         1:A:180:SER:HB2         4         0.22         0.36           (1,2685)         1:A:177:LEU:HD22         1:A:180:SER:HB2         4         0.22         0.36           (1,2685)         1:A:9:ARG:HD2         1:A:173:ALA:HB2         4         0.71         0.97           (1,2688)         1:A:9:ARG:HD2         1:A:173:ALA:HB3         4         0.71         0.97           (1,2688)         1:A:3:ARG:HD2         1:A:173:ALA:HB3         4         0.71         0.97           (1	Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,404)         1:A:14:ARG:HB2         1:A:14:ARG:HD2         4         0.18         0.27           (1,39)         1:A:40:ALA:H         1:A:36:GLU:O         4         0.07         0.16           (1,331)         1:A:11:LEU:HD11         1:A:180:SER:H         4         0.13         0.22           (1,331)         1:A:11:LEU:HD13         1:A:180:SER:H         4         0.13         0.22           (1,331)         1:A:17:LEU:HD13         1:A:180:SER:H         4         0.13         0.22           (1,331)         1:A:177:LEU:HD13         1:A:180:SER:HB2         4         0.05         0.11           (1,2685)         1:A:177:LEU:HD21         1:A:180:SER:HB2         4         0.22         0.36           (1,2685)         1:A:177:LEU:HD23         1:A:180:SER:HB2         4         0.22         0.36           (1,2688)         1:A:19-ARG:HD2         1:A:173:ALA:HB1         4         0.71         0.97           (1,268)         1:A:9-ARG:HD2         1:A:173:ALA:HB3         4         0.71         0.97           (1,258)         1:A:168:GLN:H         1:A:168:GLN:HB2         4         0.01         0.71         0.97           (1,2568)         1:A:168:GLN:H         1:A:168:GLN:HB2         4         0.7	(1,408)	1:A:14:ARG:HD2	1:A:16:ILE:HG23	4	0.24	0.38
(1,39) 1:A:40:ALA:H 1:A:36:GLU:O 4 0.07 0.16 (1,331) 1:A:11:LEU:HD11 1:A:180:SER:H 4 0.13 0.22 (1,331) 1:A:11:LEU:HD12 1:A:180:SER:H 4 0.13 0.22 (1,331) 1:A:11:LEU:HD13 1:A:180:SER:H 4 0.13 0.22 (1,331) 1:A:11:LEU:HD13 1:A:180:SER:H 4 0.13 0.22 (1,331) 1:A:11:LEU:HD13 1:A:180:SER:H 4 0.13 0.22 (1,30) 1:A:29:ARG:N 1:A:68:ER:H 4 0.13 0.22 (1,30) 1:A:29:ARG:N 1:A:68:ER:HB2 4 0.05 0.11 (1,2685) 1:A:177:LEU:HD21 1:A:180:SER:HB2 4 0.22 0.36 (1,2685) 1:A:177:LEU:HD22 1:A:180:SER:HB2 4 0.22 0.36 (1,2685) 1:A:177:LEU:HD23 1:A:180:SER:HB2 4 0.22 0.36 (1,2685) 1:A:177:LEU:HD23 1:A:180:SER:HB2 4 0.22 0.36 (1,2685) 1:A:9:ARG:HD2 1:A:173:ALA:HB1 4 0.71 0.97 (1,268) 1:A:9:ARG:HD2 1:A:173:ALA:HB1 4 0.71 0.97 (1,268) 1:A:9:ARG:HD2 1:A:173:ALA:HB3 4 0.71 0.97 (1,268) 1:A:9:ARG:HD2 1:A:173:ALA:HB3 4 0.71 0.97 (1,2593) 1:A:172:GLU:H 1:A:172:GLU:HB2 4 0.16 0.18 (1,2572) 1:A:168:GLN:HG2 1:A:168:GLN:HB2 4 0.02 0.05 (1,2564) 1:A:168:GLN:HG2 1:A:168:GLN:HB2 4 0.02 0.05 (1,2564) 1:A:168:GLN:H 1:A:168:GLN:HG2 4 0.27 0.49 (1,2516) 1:A:164:MET:HE1 1:A:168:GLN:HB2 4 0.46 0.53 (1,2516) 1:A:164:MET:HE1 1:A:168:GLN:HE21 4 0.46 0.53 (1,2516) 1:A:164:MET:HE2 1:A:168:GLN:HE21 4 0.46 0.53 (1,2516) 1:A:160:SER:HB2 1:A:161:PRO:HD2 4 0.21 0.3 (1,2470) 1:A:150:GLU:H 1:A:153:ALA:H 4 0.14 0.22 (1,2416) 1:A:151:GLU:H 1:A:153:ALA:H 4 0.14 0.22 (1,2416) 1:A:151:GLU:H 1:A:153:ALA:H 4 0.14 0.22 (1,2416) 1:A:151:GLU:H 1:A:153:ALA:H 4 0.07 0.22 (1,2416) 1:A:151:GLU:H 1:A:153:ALA:HB2 4 0.07 0.22 (1,2416) 1:A:151:GLU:H 1:A:153:ALA:HB3 4 0.07 0.22 (1,2416) 1:A:151:GLU:H 1:A:153:ALA:HB4 4 0.14 0.13 (1,2316) 1:A:138:MET:HE1 1:A:144:LEU:HD11 4 0.1 0.13 (1,2316) 1:A:138:MET:HE2 1:A:144:LEU:HD11 4 0.1 0.13 (1,2316) 1:A:138:MET:HE2 1:A:144:LEU:HD11 4 0.1	(1,407)	1:A:14:ARG:HD2	1:A:15:THR:H	4	0.61	0.71
(1,331) 1:A:11:LEU:HD11 1:A:180:SER:H 4 0.13 0.22 (1,331) 1:A:11:LEU:HD12 1:A:180:SER:H 4 0.13 0.22 (1,331) 1:A:11:LEU:HD13 1:A:180:SER:H 4 0.13 0.22 (1,331) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:180:SER:H 4 0.13 0.22 (1,331) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:180:SER:H 4 0.13 0.22 (1,331) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:180:SER:HB2 4 0.02 0.36 (1,2685) 1:A:177:LEU:HD21 1:A:180:SER:HB2 4 0.22 0.36 (1,2685) 1:A:177:LEU:HD22 1:A:180:SER:HB2 4 0.22 0.36 (1,2685) 1:A:177:LEU:HD23 1:A:180:SER:HB2 4 0.22 0.36 (1,2688) 1:A:9:ARG:HD2 1:A:173:ALA:HB3 4 0.71 0.97 (1,268) 1:A:9:ARG:HD2 1:A:173:ALA:HB3 4 0.71 0.97 (1,268) 1:A:9:ARG:HD2 1:A:173:ALA:HB3 4 0.71 0.97 (1,268) 1:A:9:ARG:HD2 1:A:173:ALA:HB3 4 0.71 0.97 (1,2593) 1:A:172:GLU:H 1:A:172:GLU:HB2 4 0.16 0.18 (1,2572) 1:A:168:GLN:HG2 1:A:168:GLN:HG2 4 0.02 0.05 (1,2584) 1:A:168:GLN:H 1:A:168:GLN:HE21 4 0.02 0.05 (1,2566) 1:A:164:MET:HE1 1:A:168:GLN:HE21 4 0.46 0.53 (1,2516) 1:A:164:MET:HE1 1:A:168:GLN:HE21 4 0.46 0.53 (1,2516) 1:A:164:MET:HE2 1:A:168:GLN:HE21 4 0.46 0.53 (1,2516) 1:A:164:MET:HE2 1:A:168:GLN:HE21 4 0.46 0.53 (1,2516) 1:A:164:MET:HE3 1:A:168:GLN:HE21 4 0.46 0.53 (1,2470) 1:A:160:SER:HB2 1:A:164:MET:HE2 4 0.46 0.53 (1,2470) 1:A:160:SER:HB2 1:A:164:MET:HG2 4 0.21 0.3 (1,2467) 1:A:160:SER:H 1:A:164:MET:HG2 4 0.66 1.24 (1,2430) 1:A:153:ALA:H 1:A:153:ALA:H 4 0.14 0.23 (1,2467) 1:A:153:ALA:H 1:A:153:ALA:H 4 0.14 0.23 (1,2467) 1:A:153:ALA:H 1:A:153:ALA:H 4 0.07 0.22 (1,2416) 1:A:151:GLU:H 1:A:153:ALA:HB2 4 0.07 0.22 (1,2416) 1:A:153:ALA:HB2 1:A:153:ALA:HB2 4 0.07 0.22 (1,2416) 1:A:153:ALA:HB2 1:A:153:ALA:HB2 4 0.07 0.22 (1,2416) 1:A:153:ALA:HB2 1:A:143:ASP:H 4 0.14 0.18 (1,2316) 1:A:138:MET:HE1 1:A:144:LEU:HD11 4 0.1 0.13 (1,2316) 1:A:138:MET:HE1 1:A:144:LEU:HD11 4 0.1 0.13 (1,2316) 1:A:138:MET:HE2 1:A:144:LEU:HD11 4 0.1 0.13 (1,2316) 1:A:138:MET:HE2 1:A:1	(1,404)	1:A:14:ARG:HB2	1:A:14:ARG:HD2	4	0.18	0.27
(1,331)         1:A:11:LEU:HD12         1:A:180:SER:H         4         0.13         0.22           (1,331)         1:A:11:LEU:HD13         1:A:180:SER:H         4         0.13         0.22           (1,300)         1:A:29:ARG:N         1:A:180:SER:HB2         4         0.05         0.11           (1,2685)         1:A:177:LEU:HD22         1:A:180:SER:HB2         4         0.22         0.36           (1,2685)         1:A:177:LEU:HD23         1:A:180:SER:HB2         4         0.22         0.36           (1,2688)         1:A:9:ARG:HD2         1:A:173:ALA:HB1         4         0.71         0.97           (1,268)         1:A:9:ARG:HD2         1:A:173:ALA:HB1         4         0.71         0.97           (1,268)         1:A:9:ARG:HD2         1:A:173:ALA:HB3         4         0.71         0.97           (1,268)         1:A:9:ARG:HD2         1:A:173:ALA:HB3         4         0.71         0.97           (1,268)         1:A:9:ARG:HD2         1:A:173:ALA:HB3         4         0.71         0.97           (1,2593)         1:A:168:GLN:HG2         1:A:168:GLN:HE21         4         0.16         0.18           (1,2516)         1:A:168:GLN:HG2         1:A:168:GLN:HE21         4         0.27	(1,39)	1:A:40:ALA:H	1:A:36:GLU:O	4	0.07	0.16
(1,331) 1:A:11:LEU:HD13 1:A:180:SER:H 4 0.13 0.22 (1,30) 1:A:29:ARG:N 1:A:6:ALA:O 4 0.05 0.11 (1,2685) 1:A:177:LEU:HD21 1:A:180:SER:HB2 4 0.22 0.36 (1,2685) 1:A:177:LEU:HD22 1:A:180:SER:HB2 4 0.22 0.36 (1,2685) 1:A:177:LEU:HD23 1:A:180:SER:HB2 4 0.22 0.36 (1,2685) 1:A:177:LEU:HD23 1:A:180:SER:HB2 4 0.22 0.36 (1,268) 1:A:17:LEU:HD23 1:A:180:SER:HB2 4 0.22 0.36 (1,268) 1:A:9:ARG:HD2 1:A:173:ALA:HB1 4 0.71 0.97 (1,268) 1:A:9:ARG:HD2 1:A:173:ALA:HB1 4 0.71 0.97 (1,268) 1:A:9:ARG:HD2 1:A:173:ALA:HB3 4 0.71 0.97 (1,268) 1:A:9:ARG:HD2 1:A:173:ALA:HB3 4 0.71 0.97 (1,2593) 1:A:172:GLU:H 1:A:172:GLU:HB2 4 0.16 0.18 (1,2572) 1:A:168:GLN:HG2 1:A:168:GLN:HE21 4 0.02 0.05 (1,2584) 1:A:168:GLN:H 1:A:168:GLN:HC2 4 0.27 0.49 (1,2528) 1:A:165:ARG:HB2 1:A:165:ARG:HD2 4 0.24 0.27 (1,2516) 1:A:164:MET:HE1 1:A:168:GLN:HE21 4 0.46 0.53 (1,2516) 1:A:164:MET:HE1 1:A:168:GLN:HE21 4 0.46 0.53 (1,2516) 1:A:164:MET:HE1 1:A:168:GLN:HE21 4 0.46 0.53 (1,2516) 1:A:164:MET:HE3 1:A:168:GLN:HE21 4 0.46 0.53 (1,2470) 1:A:160:SER:HB2 1:A:161:PRO:HD2 4 0.21 0.3 (1,2467) 1:A:160:SER:HB2 1:A:164:MET:HG2 4 0.66 1.24 (1,2430) 1:A:153:ALA:H 1:A:154:ALA:H 4 0.14 0.23 (1,2424) 1:A:151:GLU:H 1:A:153:ALA:H 4 0.66 0.82 (1,2416) 1:A:151:GLU:H 1:A:153:ALA:H 4 0.07 0.22 (1,2416) 1:A:151:GLU:H 1:A:153:ALA:HB3 4 0.07 0.22 (1,2416) 1:A:138:MET:HE1 1:A:144:LEU:HD11 4 0.1 0.13 (1,2316) 1:A:138:MET:HE1 1:A:144:LEU:HD11 4 0.1 0.13 (1,2316) 1:A:138:MET:HE1 1:A:144:LEU:HD11 4 0.1 0.13	(1,331)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:180:SER:H	4	0.13	0.22
(1,30) 1:A:29:ARG:N 1:A:6:ALA:O 4 0.05 0.11 (1,2685) 1:A:177:LEU:HD21 1:A:180:SER:HB2 4 0.22 0.36 (1,2685) 1:A:177:LEU:HD22 1:A:180:SER:HB2 4 0.22 0.36 (1,2685) 1:A:177:LEU:HD23 1:A:180:SER:HB2 4 0.22 0.36 (1,2685) 1:A:9:ARG:HD2 1:A:173:ALA:HB1 4 0.71 0.97 (1,268) 1:A:9:ARG:HD2 1:A:173:ALA:HB1 4 0.71 0.97 (1,268) 1:A:9:ARG:HD2 1:A:173:ALA:HB3 4 0.71 0.97 (1,268) 1:A:9:ARG:HD2 1:A:173:ALA:HB3 4 0.71 0.97 (1,2593) 1:A:172:GLU:H 1:A:172:GLU:HB2 4 0.16 0.18 (1,2572) 1:A:168:GLN:HG2 1:A:168:GLN:HE21 4 0.02 0.05 (1,2564) 1:A:168:GLN:HG2 1:A:168:GLN:HG2 4 0.27 0.49 (1,2528) 1:A:164:MET:HE1 1:A:165:ARG:HD2 4 0.24 0.27 (1,2516) 1:A:164:MET:HE1 1:A:168:GLN:HE21 4 0.46 0.53 (1,2516) 1:A:164:MET:HE2 1:A:168:GLN:HE21 4 0.46 0.53 (1,2516) 1:A:164:MET:HE3 1:A:168:GLN:HE21 4 0.46 0.53 (1,2516) 1:A:160:SER:HB2 1:A:161:PRO:HD2 4 0.21 0.3 (1,2470) 1:A:160:SER:HB2 1:A:164:MET:HG2 4 0.66 1.24 (1,2430) 1:A:153:ALA:H 1:A:154:ALA:H 4 0.14 0.23 (1,2424) 1:A:155:ASP:H 1:A:153:ALA:H 4 0.66 1.24 (1,2430) 1:A:151:GLU:HG2 1:A:153:ALA:H 4 0.14 0.23 (1,2424) 1:A:151:GLU:HG2 1:A:153:ALA:H 4 0.66 0.82 (1,2416) 1:A:151:GLU:HG1 1:A:153:ALA:H 4 0.07 0.22 (1,2416) 1:A:151:GLU:H 1:A:153:ALA:HB3 4 0.07 0.22 (1,2416) 1:A:131:GLU:H 1:A:144:LEU:HD11 4 0.14 0.13 (1,2316) 1:A:138:MET:HE1 1:A:144:LEU:HD11 4 0.1 0.13 (1,2316) 1:A:138:MET:HE1 1:A:144:LEU:HD11 4 0.1 0.13 (1,2316) 1:A:138:MET:HE1 1:A:144:LEU:HD11 4 0.1 0.13 (1,2316) 1:A:138:MET:HE2 1:A	(1,331)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:180:SER:H	4	0.13	0.22
(1,2685)         1:A:177:LEU:HD21         1:A:180:SER:HB2         4         0.22         0.36           (1,2685)         1:A:177:LEU:HD22         1:A:180:SER:HB2         4         0.22         0.36           (1,2685)         1:A:177:LEU:HD23         1:A:180:SER:HB2         4         0.22         0.36           (1,268)         1:A:9:ARG:HD2         1:A:173:ALA:HB1         4         0.71         0.97           (1,268)         1:A:9:ARG:HD2         1:A:173:ALA:HB3         4         0.71         0.97           (1,268)         1:A:9:ARG:HD2         1:A:173:ALA:HB3         4         0.71         0.97           (1,268)         1:A:9:ARG:HD2         1:A:173:ALA:HB3         4         0.71         0.97           (1,2593)         1:A:169:ARG:HD2         1:A:168:GLN:HB2         4         0.16         0.18           (1,2572)         1:A:168:GLN:HG2         1:A:168:GLN:HG2         4         0.27         0.49           (1,2564)         1:A:168:GLN:H         1:A:168:GLN:HG2         4         0.27         0.49           (1,2528)         1:A:164:MET:HE1         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2516)         1:A:164:MET:HE2         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46 <td>(1,331)</td> <td>1:A:11:LEU:HD13</td> <td>1:A:180:SER:H</td> <td>4</td> <td>0.13</td> <td>0.22</td>	(1,331)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:180:SER:H	4	0.13	0.22
(1,2685)         1:A:177:LEU:HD22         1:A:180:SER:HB2         4         0.22         0.36           (1,2685)         1:A:177:LEU:HD23         1:A:180:SER:HB2         4         0.22         0.36           (1,268)         1:A:9:ARG:HD2         1:A:173:ALA:HB1         4         0.71         0.97           (1,268)         1:A:9:ARG:HD2         1:A:173:ALA:HB2         4         0.71         0.97           (1,268)         1:A:9:ARG:HD2         1:A:173:ALA:HB3         4         0.71         0.97           (1,268)         1:A:9:ARG:HD2         1:A:173:ALA:HB3         4         0.71         0.97           (1,258)         1:A:168:GLN:HD2         1:A:168:GLN:HB2         4         0.16         0.18           (1,2572)         1:A:168:GLN:HG2         1:A:168:GLN:HB2         4         0.02         0.05           (1,2564)         1:A:168:GLN:H         1:A:168:GLN:HB2         4         0.27         0.49           (1,2528)         1:A:164:MET:HE1         1:A:168:GLN:HE21         4         0.24         0.27           (1,2516)         1:A:164:MET:HE2         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2516)         1:A:164:MET:HE3         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46 <td>(1,30)</td> <td>1:A:29:ARG:N</td> <td>1:A:6:ALA:O</td> <td>4</td> <td>0.05</td> <td>0.11</td>	(1,30)	1:A:29:ARG:N	1:A:6:ALA:O	4	0.05	0.11
(1,2685)         1:A:177:LEU:HD23         1:A:180:SER:HB2         4         0.22         0.36           (1,268)         1:A:9:ARG:HD2         1:A:173:ALA:HB1         4         0.71         0.97           (1,268)         1:A:9:ARG:HD2         1:A:173:ALA:HB2         4         0.71         0.97           (1,268)         1:A:9:ARG:HD2         1:A:173:ALA:HB3         4         0.71         0.97           (1,2593)         1:A:172:GLU:H         1:A:168:GLN:HB2         4         0.16         0.18           (1,2572)         1:A:168:GLN:HG2         1:A:168:GLN:HE21         4         0.02         0.05           (1,2564)         1:A:168:GLN:H         1:A:168:GLN:HG2         4         0.27         0.49           (1,2528)         1:A:164:MET:HE1         1:A:168:GLN:HE21         4         0.24         0.27           (1,2516)         1:A:164:MET:HE2         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2470)         1:A:160:SER:HB2         1:A:160:PRO:HD2         4         0.21         0.3           (1,2467)         1:A:153:ALA:H         1:A:154:ALA:H         4         0.66         1.24           (1,2430)         1:A:155:GLU:H         1:A:155:ALA:HB1         4         0.6	(1,2685)	1:A:177:LEU:HD21	1:A:180:SER:HB2	4	0.22	0.36
(1,268)         1:A:9:ARG:HD2         1:A:173:ALA:HB1         4         0.71         0.97           (1,268)         1:A:9:ARG:HD2         1:A:173:ALA:HB2         4         0.71         0.97           (1,268)         1:A:9:ARG:HD2         1:A:173:ALA:HB3         4         0.71         0.97           (1,2593)         1:A:172:GLU:H         1:A:173:ALA:HB3         4         0.71         0.97           (1,2572)         1:A:168:GLN:HG2         1:A:168:GLN:HE21         4         0.02         0.05           (1,2564)         1:A:168:GLN:HG2         1:A:168:GLN:HG2         4         0.27         0.49           (1,2528)         1:A:166:ARG:HB2         1:A:165:ARG:HD2         4         0.24         0.27           (1,2516)         1:A:164:MET:HE1         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2516)         1:A:164:MET:HE2         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2516)         1:A:164:MET:HE3         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2516)         1:A:160:SER:HB2         1:A:161:PRO:HD2         4         0.21         0.3           (1,2470)         1:A:160:SER:HB2         1:A:164:MET:HG2         4         0.66 </td <td>(1,2685)</td> <td>1:A:177:LEU:HD22</td> <td>1:A:180:SER:HB2</td> <td>4</td> <td>0.22</td> <td>0.36</td>	(1,2685)	1:A:177:LEU:HD22	1:A:180:SER:HB2	4	0.22	0.36
(1,268)         1:A:9:ARG:HD2         1:A:173:ALA:HB2         4         0.71         0.97           (1,268)         1:A:9:ARG:HD2         1:A:173:ALA:HB3         4         0.71         0.97           (1,2593)         1:A:172:GLU:H         1:A:172:GLU:HB2         4         0.16         0.18           (1,2572)         1:A:168:GLN:HG2         1:A:168:GLN:HE21         4         0.02         0.05           (1,2564)         1:A:168:GLN:H         1:A:168:GLN:HG2         4         0.27         0.49           (1,2528)         1:A:168:GLN:H         1:A:165:ARG:HB2         4         0.24         0.27         0.49           (1,2516)         1:A:164:MET:HE1         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2516)         1:A:164:MET:HE2         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2516)         1:A:164:MET:HE3         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2516)         1:A:164:MET:HE3         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2470)         1:A:160:SER:HB2         1:A:161:PRO:HD2         4         0.21         0.3           (1,2467)         1:A:153:ALA:H         1:A:164:MET:HG2         4 <td>(1,2685)</td> <td>1:A:177:LEU:HD23</td> <td>1:A:180:SER:HB2</td> <td>4</td> <td>0.22</td> <td>0.36</td>	(1,2685)	1:A:177:LEU:HD23	1:A:180:SER:HB2	4	0.22	0.36
(1,268)         1:A:9:ARG:HD2         1:A:173:ALA:HB3         4         0.71         0.97           (1,2593)         1:A:172:GLU:H         1:A:172:GLU:HB2         4         0.16         0.18           (1,2572)         1:A:168:GLN:HG2         1:A:168:GLN:HE21         4         0.02         0.05           (1,2564)         1:A:168:GLN:H         1:A:168:GLN:HG2         4         0.27         0.49           (1,2528)         1:A:164:MET:HE1         1:A:165:ARG:HD2         4         0.24         0.27           (1,2516)         1:A:164:MET:HE1         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2516)         1:A:164:MET:HE2         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2516)         1:A:164:MET:HE3         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2516)         1:A:160:SER:HB2         1:A:161:PRO:HD2         4         0.21         0.3           (1,2470)         1:A:160:SER:HB2         1:A:161:PRO:HD2         4         0.21         0.3           (1,2467)         1:A:150:GSER:HB2         1:A:161:PRO:HD2         4         0.66         1.24           (1,24467)         1:A:153:ALA:H         1:A:153:ALA:H         4         0.14<	(1,268)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:173:ALA:HB1	4	0.71	0.97
(1,2593)         1:A:172:GLU:H         1:A:172:GLU:HB2         4         0.16         0.18           (1,2572)         1:A:168:GLN:HG2         1:A:168:GLN:HE21         4         0.02         0.05           (1,2564)         1:A:168:GLN:H         1:A:168:GLN:HG2         4         0.27         0.49           (1,2528)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:165:ARG:HD2         4         0.24         0.27           (1,2516)         1:A:164:MET:HE1         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2516)         1:A:164:MET:HE2         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2516)         1:A:164:MET:HE3         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2470)         1:A:160:SER:HB2         1:A:161:PRO:HD2         4         0.21         0.3           (1,2467)         1:A:160:SER:HB2         1:A:164:MET:HG2         4         0.66         1.24           (1,2467)         1:A:153:ALA:H         1:A:153:ALA:H         4         0.14         0.23           (1,2467)         1:A:151:GLU:HG2         1:A:152:ASP:H         4         0.6         1.24           (1,2467)         1:A:151:GLU:H         1:A:152:ASP:H         4         0.6	(1,268)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:173:ALA:HB2	4	0.71	0.97
(1,2572)         1:A:168:GLN:HG2         1:A:168:GLN:HG2         4         0.02         0.05           (1,2564)         1:A:168:GLN:H         1:A:168:GLN:HG2         4         0.27         0.49           (1,2528)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:165:ARG:HD2         4         0.24         0.27           (1,2516)         1:A:164:MET:HE1         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2516)         1:A:164:MET:HE3         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2516)         1:A:164:MET:HE3         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2470)         1:A:160:SER:HB2         1:A:161:PRO:HD2         4         0.21         0.3           (1,2467)         1:A:160:SER:H         1:A:164:MET:HG2         4         0.66         1.24           (1,2430)         1:A:153:ALA:H         1:A:154:ALA:H         4         0.14         0.23           (1,2424)         1:A:151:GLU:HG2         1:A:152:ASP:H         4         0.6         0.82           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB1         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB3         4         0.07	(1,268)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:173:ALA:HB3	4	0.71	0.97
(1,2564)         1:A:168:GLN:H         1:A:168:GLN:HG2         4         0.27         0.49           (1,2528)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:165:ARG:HD2         4         0.24         0.27           (1,2516)         1:A:164:MET:HE1         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2516)         1:A:164:MET:HE2         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2516)         1:A:164:MET:HE3         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2470)         1:A:160:SER:HB2         1:A:161:PRO:HD2         4         0.21         0.3           (1,2467)         1:A:160:SER:HB         1:A:164:MET:HG2         4         0.66         1.24           (1,2430)         1:A:153:ALA:H         1:A:154:ALA:H         4         0.14         0.23           (1,2424)         1:A:151:GLU:HG2         1:A:152:ASP:H         4         0.6         0.82           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB1         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB2         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB3         4         0.07	(1,2593)	1:A:172:GLU:H	1:A:172:GLU:HB2	4	0.16	0.18
(1,2528)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:165:ARG:HD2         4         0.24         0.27           (1,2516)         1:A:164:MET:HE1         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2516)         1:A:164:MET:HE2         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2516)         1:A:164:MET:HE3         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2470)         1:A:160:SER:HB2         1:A:161:PRO:HD2         4         0.21         0.3           (1,2467)         1:A:160:SER:H         1:A:164:MET:HG2         4         0.66         1.24           (1,2430)         1:A:153:ALA:H         1:A:154:ALA:H         4         0.14         0.23           (1,2424)         1:A:151:GLU:HG2         1:A:153:ALA:H         4         0.6         0.82           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB1         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB3         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB3         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:1417:GLY:HA2         1:A:148:PRO:HD2         4         0.32	(1,2572)	1:A:168:GLN:HG2	1:A:168:GLN:HE21	4	0.02	0.05
(1,2516)         1:A:164:MET:HE1         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2516)         1:A:164:MET:HE2         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2516)         1:A:164:MET:HE3         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2470)         1:A:160:SER:HB2         1:A:161:PRO:HD2         4         0.21         0.3           (1,2467)         1:A:160:SER:H         1:A:164:MET:HG2         4         0.66         1.24           (1,2430)         1:A:153:ALA:H         1:A:154:ALA:H         4         0.14         0.23           (1,2424)         1:A:152:ASP:H         1:A:153:ALA:H         4         0.27         0.43           (1,2420)         1:A:151:GLU:HG2         1:A:152:ASP:H         4         0.6         0.82           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB1         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB3         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:141:GLY:H         1:A:153:ALA:HB3         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:1414:GLY:H         1:A:148:PRO:HD2         4         0.32	(1,2564)	1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HG2	4	0.27	0.49
(1,2516)         1:A:164:MET:HE2         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2516)         1:A:164:MET:HE3         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2470)         1:A:160:SER:HB2         1:A:161:PRO:HD2         4         0.21         0.3           (1,2467)         1:A:160:SER:H         1:A:164:MET:HG2         4         0.66         1.24           (1,2430)         1:A:153:ALA:H         1:A:153:ALA:H         4         0.14         0.23           (1,2424)         1:A:152:ASP:H         1:A:153:ALA:H         4         0.27         0.43           (1,2420)         1:A:151:GLU:HG2         1:A:152:ASP:H         4         0.6         0.82           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB1         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB2         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB3         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB3         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:141:GLY:HA2         1:A:148:PRO:HD2         4         0.32	(1,2528)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:165:ARG:HD2	4	0.24	0.27
(1,2516)         1:A:164:MET:HE3         1:A:168:GLN:HE21         4         0.46         0.53           (1,2470)         1:A:160:SER:HB2         1:A:161:PRO:HD2         4         0.21         0.3           (1,2467)         1:A:160:SER:H         1:A:164:MET:HG2         4         0.66         1.24           (1,2430)         1:A:153:ALA:H         1:A:154:ALA:H         4         0.14         0.23           (1,2424)         1:A:152:ASP:H         1:A:153:ALA:H         4         0.27         0.43           (1,2420)         1:A:151:GLU:HG2         1:A:152:ASP:H         4         0.6         0.82           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB1         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB2         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB3         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:152:ASP:H         4         0.08         0.17           (1,2363)         1:A:147:GLY:HA2         1:A:148:PRO:HD2         4         0.32         0.64           (1,2364)         1:A:141:ARG:H         1:A:142:GLY:H         4         0.14         0.1	(1,2516)	1:A:164:MET:HE1	1:A:168:GLN:HE21	4	0.46	0.53
(1,2470)         1:A:160:SER:HB2         1:A:161:PRO:HD2         4         0.21         0.3           (1,2467)         1:A:160:SER:H         1:A:164:MET:HG2         4         0.66         1.24           (1,2430)         1:A:153:ALA:H         1:A:154:ALA:H         4         0.14         0.23           (1,2424)         1:A:152:ASP:H         1:A:153:ALA:H         4         0.27         0.43           (1,2420)         1:A:151:GLU:HG2         1:A:152:ASP:H         4         0.6         0.82           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB1         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB2         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB3         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:152:ASP:H         4         0.08         0.17           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:152:ASP:H         4         0.08         0.17           (1,2415)         1:A:141:GLU:H         1:A:148:PRO:HD2         4         0.32         0.64           (1,2387)         1:A:144:GLY:HA2         1:A:144:LEU:HD11         4         0.12         0.17<	(1,2516)	1:A:164:MET:HE2	1:A:168:GLN:HE21	4	0.46	0.53
(1,2467)         1:A:160:SER:H         1:A:164:MET:HG2         4         0.66         1.24           (1,2430)         1:A:153:ALA:H         1:A:154:ALA:H         4         0.14         0.23           (1,2424)         1:A:152:ASP:H         1:A:153:ALA:H         4         0.27         0.43           (1,2420)         1:A:151:GLU:HG2         1:A:152:ASP:H         4         0.6         0.82           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB1         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB2         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB3         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB3         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:152:ASP:H         4         0.08         0.17           (1,2316)         1:A:147:GLY:HA2         1:A:148:PRO:HD2         4         0.32         0.64           (1,2387)         1:A:141:ARG:H         1:A:142:GLY:H         4         0.12         0.17           (1,2354)         1:A:138:MET:HE1         1:A:144:LEU:HD11         4         0.1         0.13<	(1,2516)	1:A:164:MET:HE3	1:A:168:GLN:HE21	4	0.46	0.53
(1,2430)         1:A:153:ALA:H         1:A:154:ALA:H         4         0.14         0.23           (1,2424)         1:A:152:ASP:H         1:A:153:ALA:H         4         0.27         0.43           (1,2420)         1:A:151:GLU:HG2         1:A:152:ASP:H         4         0.6         0.82           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB1         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB2         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB3         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:152:ASP:H         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:147:GLY:HA2         1:A:148:PRO:HD2         4         0.08         0.17           (1,2387)         1:A:147:GLY:HA2         1:A:148:PRO:HD2         4         0.32         0.64           (1,2363)         1:A:141:ARG:H         1:A:142:GLY:H         4         0.12         0.17           (1,2354)         1:A:138:MET:HE1         1:A:144:LEU:HD11         4         0.1         0.13           (1,2316)         1:A:138:MET:HE2         1:A:144:LEU:HD12         4         0.1         0	(1,2470)	1:A:160:SER:HB2	1:A:161:PRO:HD2	4	0.21	0.3
(1,2424)         1:A:152:ASP:H         1:A:153:ALA:H         4         0.27         0.43           (1,2420)         1:A:151:GLU:HG2         1:A:152:ASP:H         4         0.6         0.82           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB1         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB2         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB3         4         0.07         0.22           (1,2415)         1:A:151:GLU:H         1:A:152:ASP:H         4         0.08         0.17           (1,2387)         1:A:147:GLY:HA2         1:A:148:PRO:HD2         4         0.32         0.64           (1,2363)         1:A:142:GLY:H         1:A:143:ASP:H         4         0.12         0.17           (1,2354)         1:A:141:ARG:H         1:A:142:GLY:H         4         0.14         0.18           (1,2316)         1:A:138:MET:HE1         1:A:144:LEU:HD11         4         0.1         0.13           (1,2316)         1:A:138:MET:HE2         1:A:144:LEU:HD12         4         0.1         0.13           (1,2316)         1:A:138:MET:HE2         1:A:144:LEU:HD12         4         0.1         0	(1,2467)	1:A:160:SER:H	1:A:164:MET:HG2	4	0.66	1.24
(1,2420)         1:A:151:GLU:HG2         1:A:152:ASP:H         4         0.6         0.82           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB1         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB2         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB3         4         0.07         0.22           (1,2415)         1:A:151:GLU:H         1:A:152:ASP:H         4         0.08         0.17           (1,2387)         1:A:147:GLY:HA2         1:A:148:PRO:HD2         4         0.32         0.64           (1,2363)         1:A:142:GLY:H         1:A:143:ASP:H         4         0.12         0.17           (1,2354)         1:A:141:ARG:H         1:A:142:GLY:H         4         0.14         0.18           (1,2316)         1:A:138:MET:HE1         1:A:144:LEU:HD11         4         0.1         0.13           (1,2316)         1:A:138:MET:HE2         1:A:144:LEU:HD12         4         0.1         0.13           (1,2316)         1:A:138:MET:HE2         1:A:144:LEU:HD12         4         0.1         0.13           (1,2316)         1:A:138:MET:HE2         1:A:144:LEU:HD13         4         0.1         <	(1,2430)	1:A:153:ALA:H	1:A:154:ALA:H	4	0.14	0.23
(1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB1         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB2         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB3         4         0.07         0.22           (1,2415)         1:A:151:GLU:H         1:A:152:ASP:H         4         0.08         0.17           (1,2387)         1:A:147:GLY:HA2         1:A:148:PRO:HD2         4         0.32         0.64           (1,2363)         1:A:142:GLY:H         1:A:143:ASP:H         4         0.12         0.17           (1,2354)         1:A:141:ARG:H         1:A:142:GLY:H         4         0.14         0.18           (1,2316)         1:A:138:MET:HE1         1:A:144:LEU:HD11         4         0.1         0.13           (1,2316)         1:A:138:MET:HE1         1:A:144:LEU:HD13         4         0.1         0.13           (1,2316)         1:A:138:MET:HE2         1:A:144:LEU:HD12         4         0.1         0.13           (1,2316)         1:A:138:MET:HE2         1:A:144:LEU:HD12         4         0.1         0.13           (1,2316)         1:A:138:MET:HE2         1:A:144:LEU:HD13         4         0.1	(1,2424)	1:A:152:ASP:H	1:A:153:ALA:H	4	0.27	0.43
(1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB2         4         0.07         0.22           (1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB3         4         0.07         0.22           (1,2415)         1:A:151:GLU:H         1:A:152:ASP:H         4         0.08         0.17           (1,2387)         1:A:147:GLY:HA2         1:A:148:PRO:HD2         4         0.32         0.64           (1,2363)         1:A:142:GLY:H         1:A:143:ASP:H         4         0.12         0.17           (1,2354)         1:A:141:ARG:H         1:A:142:GLY:H         4         0.14         0.18           (1,2316)         1:A:138:MET:HE1         1:A:144:LEU:HD11         4         0.1         0.13           (1,2316)         1:A:138:MET:HE1         1:A:144:LEU:HD13         4         0.1         0.13           (1,2316)         1:A:138:MET:HE2         1:A:144:LEU:HD12         4         0.1         0.13           (1,2316)         1:A:138:MET:HE2         1:A:144:LEU:HD12         4         0.1         0.13           (1,2316)         1:A:138:MET:HE2         1:A:144:LEU:HD13         4         0.1         0.13           (1,2316)         1:A:138:MET:HE3         1:A:144:LEU:HD11         4         0.1	(1,2420)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:152:ASP:H	4	0.6	0.82
(1,2416)         1:A:151:GLU:H         1:A:153:ALA:HB3         4         0.07         0.22           (1,2415)         1:A:151:GLU:H         1:A:152:ASP:H         4         0.08         0.17           (1,2387)         1:A:147:GLY:HA2         1:A:148:PRO:HD2         4         0.32         0.64           (1,2363)         1:A:142:GLY:H         1:A:143:ASP:H         4         0.12         0.17           (1,2354)         1:A:141:ARG:H         1:A:142:GLY:H         4         0.14         0.18           (1,2316)         1:A:138:MET:HE1         1:A:144:LEU:HD11         4         0.1         0.13           (1,2316)         1:A:138:MET:HE1         1:A:144:LEU:HD13         4         0.1         0.13           (1,2316)         1:A:138:MET:HE2         1:A:144:LEU:HD12         4         0.1         0.13           (1,2316)         1:A:138:MET:HE2         1:A:144:LEU:HD12         4         0.1         0.13           (1,2316)         1:A:138:MET:HE2         1:A:144:LEU:HD13         4         0.1         0.13           (1,2316)         1:A:138:MET:HE3         1:A:144:LEU:HD11         4         0.1         0.13	(1,2416)	1:A:151:GLU:H	1:A:153:ALA:HB1	4	0.07	0.22
(1,2415)       1:A:151:GLU:H       1:A:152:ASP:H       4       0.08       0.17         (1,2387)       1:A:147:GLY:HA2       1:A:148:PRO:HD2       4       0.32       0.64         (1,2363)       1:A:142:GLY:H       1:A:143:ASP:H       4       0.12       0.17         (1,2354)       1:A:141:ARG:H       1:A:142:GLY:H       4       0.14       0.18         (1,2316)       1:A:138:MET:HE1       1:A:144:LEU:HD11       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE1       1:A:144:LEU:HD13       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE2       1:A:144:LEU:HD11       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE2       1:A:144:LEU:HD12       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE2       1:A:144:LEU:HD13       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE2       1:A:144:LEU:HD13       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE3       1:A:144:LEU:HD11       4       0.1       0.13	(1,2416)	1:A:151:GLU:H	1:A:153:ALA:HB2	4	0.07	0.22
(1,2387)       1:A:147:GLY:HA2       1:A:148:PRO:HD2       4       0.32       0.64         (1,2363)       1:A:142:GLY:H       1:A:143:ASP:H       4       0.12       0.17         (1,2354)       1:A:141:ARG:H       1:A:142:GLY:H       4       0.14       0.18         (1,2316)       1:A:138:MET:HE1       1:A:144:LEU:HD11       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE1       1:A:144:LEU:HD13       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE2       1:A:144:LEU:HD11       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE2       1:A:144:LEU:HD12       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE2       1:A:144:LEU:HD13       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE3       1:A:144:LEU:HD13       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE3       1:A:144:LEU:HD11       4       0.1       0.13	(1,2416)	1:A:151:GLU:H	1:A:153:ALA:HB3	4	0.07	0.22
(1,2363)       1:A:142:GLY:H       1:A:143:ASP:H       4       0.12       0.17         (1,2354)       1:A:141:ARG:H       1:A:142:GLY:H       4       0.14       0.18         (1,2316)       1:A:138:MET:HE1       1:A:144:LEU:HD11       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE1       1:A:144:LEU:HD12       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE2       1:A:144:LEU:HD11       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE2       1:A:144:LEU:HD12       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE2       1:A:144:LEU:HD13       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE3       1:A:144:LEU:HD11       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE3       1:A:144:LEU:HD11       4       0.1       0.13	(1,2415)	1:A:151:GLU:H	1:A:152:ASP:H	4	0.08	0.17
(1,2354)       1:A:141:ARG:H       1:A:142:GLY:H       4       0.14       0.18         (1,2316)       1:A:138:MET:HE1       1:A:144:LEU:HD11       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE1       1:A:144:LEU:HD12       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE1       1:A:144:LEU:HD13       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE2       1:A:144:LEU:HD11       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE2       1:A:144:LEU:HD13       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE2       1:A:144:LEU:HD13       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE3       1:A:144:LEU:HD11       4       0.1       0.13	(1,2387)	1:A:147:GLY:HA2	1:A:148:PRO:HD2	4	0.32	0.64
(1,2316)       1:A:138:MET:HE1       1:A:144:LEU:HD11       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE1       1:A:144:LEU:HD12       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE1       1:A:144:LEU:HD13       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE2       1:A:144:LEU:HD11       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE2       1:A:144:LEU:HD12       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE2       1:A:144:LEU:HD13       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE3       1:A:144:LEU:HD11       4       0.1       0.13	(1,2363)	1:A:142:GLY:H	1:A:143:ASP:H	4	0.12	0.17
(1,2316)       1:A:138:MET:HE1       1:A:144:LEU:HD12       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE1       1:A:144:LEU:HD13       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE2       1:A:144:LEU:HD11       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE2       1:A:144:LEU:HD12       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE2       1:A:144:LEU:HD13       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE3       1:A:144:LEU:HD11       4       0.1       0.13	(1,2354)	1:A:141:ARG:H	1:A:142:GLY:H	4	0.14	0.18
(1,2316)       1:A:138:MET:HE1       1:A:144:LEU:HD13       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE2       1:A:144:LEU:HD11       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE2       1:A:144:LEU:HD12       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE2       1:A:144:LEU:HD13       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE3       1:A:144:LEU:HD11       4       0.1       0.13	(1,2316)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD11	4	0.1	0.13
(1,2316)       1:A:138:MET:HE2       1:A:144:LEU:HD11       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE2       1:A:144:LEU:HD12       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE2       1:A:144:LEU:HD13       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE3       1:A:144:LEU:HD11       4       0.1       0.13	(1,2316)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD12	4	0.1	0.13
(1,2316)       1:A:138:MET:HE2       1:A:144:LEU:HD12       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE2       1:A:144:LEU:HD13       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE3       1:A:144:LEU:HD11       4       0.1       0.13	(1,2316)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD13	4	0.1	0.13
(1,2316)       1:A:138:MET:HE2       1:A:144:LEU:HD13       4       0.1       0.13         (1,2316)       1:A:138:MET:HE3       1:A:144:LEU:HD11       4       0.1       0.13	(1,2316)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD11	4	0.1	0.13
(1,2316) 1:A:138:MET:HE3 1:A:144:LEU:HD11 4 0.1 0.13	(1,2316)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD12	4	0.1	0.13
	(1,2316)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD13	4	0.1	0.13
(1.2316) 1:A:138:MET:HE3 1:A:144:LEU:HD12 4 0.1 0.13	(1,2316)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD11	4	0.1	0.13
(1,2010)   111111111111111111111111111111111	(1,2316)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD12	4	0.1	0.13
(1,2316) 1:A:138:MET:HE3 1:A:144:LEU:HD13 4 0.1 0.13	(1,2316)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD13	4	0.1	0.13



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,2314)	1:A:138:MET:HE1	1:A:143:ASP:HB3	4	0.06	0.13
(1,2314)	1:A:138:MET:HE2	1:A:143:ASP:HB3	4	0.06	0.13
(1,2314)	1:A:138:MET:HE3	1:A:143:ASP:HB3	4	0.06	0.13
(1,2126)	1:A:123:VAL:HG21	1:A:179:HIS:HD2	4	0.15	0.26
(1,2126)	1:A:123:VAL:HG22	1:A:179:HIS:HD2	4	0.15	0.26
(1,2126)	1:A:123:VAL:HG23	1:A:179:HIS:HD2	4	0.15	0.26
(1,2053)	1:A:120:GLN:HG2	1:A:120:GLN:HE21	4	0.04	0.05
(1,2030)	1:A:119:GLU:HA	1:A:122:LEU:HD11	4	0.05	0.11
(1,2030)	1:A:119:GLU:HA	1:A:122:LEU:HD12	4	0.05	0.11
(1,2030)	1:A:119:GLU:HA	1:A:122:LEU:HD13	4	0.05	0.11
(1,1950)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:114:HIS:HB3	4	0.08	0.11
(1,1950)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:114:HIS:HB3	4	0.08	0.11
(1,1950)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:114:HIS:HB3	4	0.08	0.11
(1,192)	1:A:179:HIS:N	1:A:175:ALA:O	4	0.04	0.09
(1,1866)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD21	4	0.29	0.56
(1,1866)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD22	4	0.29	0.56
(1,1866)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD23	4	0.29	0.56
(1,1865)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD11	4	0.6	1.16
(1,1865)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD12	4	0.6	1.16
(1,1865)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD13	4	0.6	1.16
(1,1854)	1:A:104:GLU:H	1:A:108:THR:HG21	4	0.03	0.07
(1,1854)	1:A:104:GLU:H	1:A:108:THR:HG22	4	0.03	0.07
(1,1854)	1:A:104:GLU:H	1:A:108:THR:HG23	4	0.03	0.07
(1,1829)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:HD21	4	0.03	0.03
(1,1829)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:HD22	4	0.03	0.03
(1,1829)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:HD23	4	0.03	0.03
(1,173)	1:A:170:ARG:H	1:A:166:ILE:O	4	0.08	0.15
(1,1728)	1:A:95:SER:HB2	1:A:114:HIS:HD2	4	0.14	0.3
(1,1719)	1:A:93:PRO:HA	1:A:94:ASP:H	4	0.07	0.09
(1,1715)	1:A:92:LYS:HE2	1:A:121:MET:HE1	4	0.25	0.49
(1,1715)	1:A:92:LYS:HE2	1:A:121:MET:HE2	4	0.25	0.49
(1,1715)	1:A:92:LYS:HE2	1:A:121:MET:HE3	4	0.25	0.49
(1,1708)	1:A:92:LYS:HA	1:A:92:LYS:HD2	4	0.7	1.63
(1,1696)	1:A:90:GLU:HA	1:A:90:GLU:HG2	4	0.26	0.31
(1,1693)	1:A:90:GLU:H	1:A:90:GLU:HB2	4	0.22	0.52
(1,169)	1:A:168:GLN:H	1:A:164:MET:O	4	0.03	0.06
(1,1689)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:121:MET:HE1	4	0.17	0.28
(1,1689)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:121:MET:HE2	4	0.17	0.28
(1,1689)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:121:MET:HE3	4	0.17	0.28
(1,1672)	1:A:89:TYR:HA	1:A:89:TYR:HD1	4	0.36	0.52
(1,167)	1:A:167:SER:H	1:A:163:MET:O	4	0.07	0.15
(1,1652)	1:A:87:TRP:HZ2	1:A:121:MET:HE1	4	0.05	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1652)	1:A:87:TRP:HZ2	1:A:121:MET:HE2	4	0.05	0.07
(1,1652)	1:A:87:TRP:HZ2	1:A:121:MET:HE3	4	0.05	0.07
(1,1565)	1:A:82:ARG:HB3	1:A:99:LEU:H	4	0.05	0.09
(1,1541)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:81:ARG:HG2	4	0.63	1.15
(1,1541)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:81:ARG:HG2	4	0.63	1.15
(1,1531)	1:A:78:GLU:H	1:A:79:PRO:HD2	4	0.25	0.38
(1,151)	1:A:137:GLY:H	1:A:133:LEU:O	4	0.03	0.08
(1,1429)	1:A:70:ALA:HA	1:A:89:TYR:HD1	4	0.61	0.98
(1,1419)	1:A:69:ASN:HA	1:A:89:TYR:HD1	4	0.43	0.62
(1,1413)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:H	4	0.17	0.28
(1,1336)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HD11	4	0.22	0.31
(1,1336)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HD12	4	0.22	0.31
(1,1336)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HD13	4	0.22	0.31
(1,1330)	1:A:60:GLU:HG2	1:A:77:CYS:H	4	0.3	0.99
(1,1328)	1:A:60:GLU:HG3	1:A:61:GLY:H	4	0.15	0.35
(1,1267)	1:A:55:LYS:HA	1:A:55:LYS:HG2	4	0.28	0.33
(1,1170)	1:A:50:TRP:H	1:A:51:PHE:H	4	0.09	0.11
(1,1155)	1:A:49:ARG:H	1:A:49:ARG:HD2	4	0.38	0.84
(1,102)	1:A:102:SER:N	1:A:109:LEU:O	4	0.04	0.06
(1,97)	1:A:100:ARG:H	1:A:111:GLU:O	3	0.04	0.06
(1,940)	1:A:36:GLU:HG2	1:A:37:VAL:H	3	0.07	0.19
(1,869)	1:A:34:VAL:H	1:A:103:GLU:HG3	3	0.04	0.05
(1,866)	1:A:33:PRO:HG2	1:A:34:VAL:H	3	0.46	0.72
(1,862)	1:A:33:PRO:HG3	1:A:36:GLU:H	3	0.1	0.11
(1,837)	1:A:32:ALA:H	1:A:33:PRO:HD2	3	0.19	0.3
(1,775)	1:A:29:ARG:HG2	1:A:29:ARG:HE	3	0.18	0.23
(1,769)	1:A:29:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD21	3	0.07	0.1
(1,769)	1:A:29:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD22	3	0.07	0.1
(1,769)	1:A:29:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD23	3	0.07	0.1
(1,745)	1:A:28:GLN:HG2	1:A:29:ARG:H	3	0.08	0.11
(1,719)	1:A:27:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD21	3	0.08	0.11
(1,719)	1:A:27:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD22	3	0.08	0.11
(1,719)	1:A:27:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD23	3	0.08	0.11
(1,688)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:28:GLN:HE21	3	0.1	0.14
(1,688)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:28:GLN:HE21	3	0.1	0.14
(1,688)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:28:GLN:HE21	3	0.1	0.14
(1,673)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:112:LEU:HD11	3	0.06	0.11
(1,673)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:112:LEU:HD12	3	0.06	0.11
(1,673)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:112:LEU:HD13	3	0.06	0.11
(1,673)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:112:LEU:HD11	3	0.06	0.11
(1,673)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:112:LEU:HD12	3	0.06	0.11
(1,673)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:112:LEU:HD13	3	0.06	0.11



Continued from previous page...

(1,673) (1,673)	1:A:26:ILE:HD13			` '	$\operatorname{Max}(A)$
(1.673)	1.71.20.11111111	1:A:112:LEU:HD11	3	0.06	0.11
(-, -, -, -)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:112:LEU:HD12	3	0.06	0.11
(1,673)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:112:LEU:HD13	3	0.06	0.11
(1,67)	1:A:72:GLY:H	1:A:64:PHE:O	3	0.05	0.07
(1,633)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:114:HIS:H	3	0.14	0.25
(1,633)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:114:HIS:H	3	0.14	0.25
(1,633)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:114:HIS:H	3	0.14	0.25
(1,61)	1:A:64:PHE:H	1:A:72:GLY:O	3	0.09	0.22
(1,549)	1:A:23:SER:HB2	1:A:116:THR:H	3	0.13	0.14
(1,493)	1:A:20:GLU:H	1:A:20:GLU:HB2	3	0.17	0.2
(1,490)	1:A:19:GLY:HA2	1:A:117:THR:HG21	3	0.06	0.09
(1,490)	1:A:19:GLY:HA2	1:A:117:THR:HG22	3	0.06	0.09
(1,490)	1:A:19:GLY:HA2	1:A:117:THR:HG23	3	0.06	0.09
(1,456)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:95:SER:HB2	3	0.48	0.72
(1,456)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:95:SER:HB2	3	0.48	0.72
(1,456)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:95:SER:HB2	3	0.48	0.72
(1,423)	1:A:15:THR:HG21	1:A:20:GLU:HG2	3	0.47	1.01
(1,423)	1:A:15:THR:HG22	1:A:20:GLU:HG2	3	0.47	1.01
(1,423)	1:A:15:THR:HG23	1:A:20:GLU:HG2	3	0.47	1.01
(1,405)	1:A:14:ARG:HB2	1:A:23:SER:HB2	3	0.81	1.26
(1,389)	1:A:14:ARG:H	1:A:23:SER:H	3	0.05	0.07
(1,322)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:25:ILE:HD11	3	0.38	0.9
(1,322)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:25:ILE:HD12	3	0.38	0.9
(1,322)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:25:ILE:HD13	3	0.38	0.9
(1,295)	1:A:10:ALA:HB1	1:A:25:ILE:HD11	3	0.07	0.08
(1,295)	1:A:10:ALA:HB1	1:A:25:ILE:HD12	3	0.07	0.08
(1,295)	1:A:10:ALA:HB1	1:A:25:ILE:HD13	3	0.07	0.08
(1,295)	1:A:10:ALA:HB2	1:A:25:ILE:HD11	3	0.07	0.08
(1,295)	1:A:10:ALA:HB2	1:A:25:ILE:HD12	3	0.07	0.08
(1,295)	1:A:10:ALA:HB2	1:A:25:ILE:HD13	3	0.07	0.08
(1,295)	1:A:10:ALA:HB3	1:A:25:ILE:HD11	3	0.07	0.08
(1,295)	1:A:10:ALA:HB3	1:A:25:ILE:HD12	3	0.07	0.08
(1,295)	1:A:10:ALA:HB3	1:A:25:ILE:HD13	3	0.07	0.08
(1,2713)	1:A:181:GLY:H	1:A:182:SER:H	3	0.03	0.05
(1,262)	1:A:9:ARG:HG3	1:A:10:ALA:H	3	0.05	0.07
(1,2577)	1:A:169:GLU:HA	1:A:172:GLU:HB2	3	0.34	0.4
(1,257)	1:A:9:ARG:HE	1:A:174:TRP:HD1	3	0.11	0.15
(1,2515)	1:A:164:MET:HE1	1:A:168:GLN:HE22	3	0.06	0.15
(1,2515)	1:A:164:MET:HE2	1:A:168:GLN:HE22	3	0.06	0.15
(1,2515)	1:A:164:MET:HE3	1:A:168:GLN:HE22	3	0.06	0.15
(1,2513)	1:A:164:MET:HE1	1:A:165:ARG:H	3	0.07	0.11
(1,2513)	1:A:164:MET:HE2	1:A:165:ARG:H	3	0.07	0.11



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,2513)	1:A:164:MET:HE3	1:A:165:ARG:H	3	0.07	0.11
(1,2512)	1:A:164:MET:HB2	1:A:167:SER:H	3	0.15	0.21
(1,2505)	1:A:163:MET:HE1	1:A:167:SER:HB2	3	0.84	1.47
(1,2505)	1:A:163:MET:HE2	1:A:167:SER:HB2	3	0.84	1.47
(1,2505)	1:A:163:MET:HE3	1:A:167:SER:HB2	3	0.84	1.47
(1,2503)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HG21	3	0.05	0.08
(1,2503)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HG22	3	0.05	0.08
(1,2503)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HG23	3	0.05	0.08
(1,2503)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HG21	3	0.05	0.08
(1,2503)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HG22	3	0.05	0.08
(1,2503)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HG23	3	0.05	0.08
(1,2503)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HG21	3	0.05	0.08
(1,2503)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HG22	3	0.05	0.08
(1,2503)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HG23	3	0.05	0.08
(1,2502)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HD11	3	0.11	0.16
(1,2502)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HD12	3	0.11	0.16
(1,2502)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HD13	3	0.11	0.16
(1,2502)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HD11	3	0.11	0.16
(1,2502)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HD12	3	0.11	0.16
(1,2502)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HD13	3	0.11	0.16
(1,2502)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HD11	3	0.11	0.16
(1,2502)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HD12	3	0.11	0.16
(1,2502)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HD13	3	0.11	0.16
(1,2466)	1:A:160:SER:H	1:A:164:MET:HE1	3	0.06	0.07
(1,2466)	1:A:160:SER:H	1:A:164:MET:HE2	3	0.06	0.07
(1,2466)	1:A:160:SER:H	1:A:164:MET:HE3	3	0.06	0.07
(1,2459)	1:A:158:GLU:HA	1:A:159:PRO:HG2	3	0.96	1.24
(1,2458)	1:A:158:GLU:HA	1:A:159:PRO:HD2	3	0.78	1.16
(1,243)	1:A:9:ARG:H	1:A:177:LEU:HD11	3	0.08	0.13
(1,243)	1:A:9:ARG:H	1:A:177:LEU:HD12	3	0.08	0.13
(1,243)	1:A:9:ARG:H	1:A:177:LEU:HD13	3	0.08	0.13
(1,2414)	1:A:151:GLU:H	1:A:151:GLU:HG2	3	0.22	0.31
(1,2412)	1:A:150:PRO:HG2	1:A:151:GLU:H	3	0.2	0.23
(1,2402)	1:A:149:VAL:HB	1:A:152:ASP:H	3	0.12	0.26
(1,240)	1:A:8:GLU:HG2	1:A:27:ARG:HB2	3	0.36	0.43
(1,2329)	1:A:139:PHE:HB3	1:A:144:LEU:HD11	3	0.19	0.38
(1,2329)	1:A:139:PHE:HB3	1:A:144:LEU:HD12	3	0.19	0.38
(1,2329)	1:A:139:PHE:HB3	1:A:144:LEU:HD13	3	0.19	0.38
(1,2315)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HA	3	0.05	0.07
(1,2315)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HA	3	0.05	0.07
(1,2315)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HA	3	0.05	0.07
(1,229)	1:A:8:GLU:HA	1:A:8:GLU:HG2	3	0.25	0.31



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,2288)	1:A:136:LEU:HD11	1:A:139:PHE:HD1	3	0.04	0.06
(1,2288)	1:A:136:LEU:HD11	1:A:139:PHE:HD2	3	0.04	0.06
(1,2288)	1:A:136:LEU:HD12	1:A:139:PHE:HD1	3	0.04	0.06
(1,2288)	1:A:136:LEU:HD12	1:A:139:PHE:HD2	3	0.04	0.06
(1,2288)	1:A:136:LEU:HD13	1:A:139:PHE:HD1	3	0.04	0.06
(1,2288)	1:A:136:LEU:HD13	1:A:139:PHE:HD2	3	0.04	0.06
(1,2229)	1:A:131:MET:HE1	1:A:132:ALA:H	3	0.08	0.09
(1,2229)	1:A:131:MET:HE2	1:A:132:ALA:H	3	0.08	0.09
(1,2229)	1:A:131:MET:HE3	1:A:132:ALA:H	3	0.08	0.09
(1,2191)	1:A:127:VAL:HG21	1:A:174:TRP:H	3	0.08	0.12
(1,2191)	1:A:127:VAL:HG22	1:A:174:TRP:H	3	0.08	0.12
(1,2191)	1:A:127:VAL:HG23	1:A:174:TRP:H	3	0.08	0.12
(1,208)	1:A:7:THR:HA	1:A:28:GLN:HG2	3	0.32	0.45
(1,2069)	1:A:121:MET:HG2	1:A:125:VAL:HG21	3	0.1	0.16
(1,2069)	1:A:121:MET:HG2	1:A:125:VAL:HG22	3	0.1	0.16
(1,2069)	1:A:121:MET:HG2	1:A:125:VAL:HG23	3	0.1	0.16
(1,2041)	1:A:119:GLU:HG2	1:A:120:GLN:H	3	0.14	0.18
(1,2019)	1:A:118:SER:HA	1:A:121:MET:H	3	0.05	0.1
(1,196)	1:A:5:GLN:HA	1:A:6:ALA:H	3	0.2	0.25
(1,1944)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:GLU:H	3	0.06	0.11
(1,1944)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:GLU:H	3	0.06	0.11
(1,1944)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:GLU:H	3	0.06	0.11
(1,1908)	1:A:109:LEU:HG	1:A:111:GLU:HG2	3	0.11	0.18
(1,189)	1:A:178:VAL:H	1:A:174:TRP:O	3	0.04	0.06
(1,187)	1:A:177:LEU:H	1:A:173:ALA:O	3	0.04	0.06
(1,1868)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:HB2	3	0.62	0.97
(1,1864)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HB2	3	0.6	0.92
(1,1863)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:H	3	0.91	1.14
(1,1851)	1:A:104:GLU:H	1:A:104:GLU:HB2	3	0.35	0.48
(1,1838)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:HD21	3	0.15	0.29
(1,1838)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:HD22	3	0.15	0.29
(1,1838)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:HD23	3	0.15	0.29
(1,1817)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:H	3	0.03	0.08
(1,1817)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:H	3	0.03	0.08
(1,1817)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:H	3	0.03	0.08
(1,1765)	1:A:98:GLU:HG2	1:A:99:LEU:H	3	0.09	0.13
(1,1730)	1:A:95:SER:HB2	1:A:121:MET:HE1	3	0.18	0.24
(1,1730)	1:A:95:SER:HB2	1:A:121:MET:HE2	3	0.18	0.24
(1,1730)	1:A:95:SER:HB2	1:A:121:MET:HE3	3	0.18	0.24
(1,1717)	1:A:92:LYS:HG2	1:A:92:LYS:HE2	3	0.28	0.3
(1,1709)	1:A:92:LYS:HA	1:A:92:LYS:HE2	3	0.45	0.57
(1,1705)	1:A:92:LYS:H	1:A:92:LYS:HB2	3	0.24	0.4



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1682)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:121:MET:HE1	3	0.18	0.26
(1,1682)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:121:MET:HE2	3	0.18	0.26
(1,1682)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:121:MET:HE3	3	0.18	0.26
(1,1679)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:HB2	3	1.4	1.76
(1,165)	1:A:166:ILE:H	1:A:162:GLU:O	3	0.05	0.12
(1,1594)	1:A:84:THR:HA	1:A:98:GLU:HB2	3	0.55	0.83
(1,1534)	1:A:78:GLU:H	1:A:82:ARG:HG2	3	0.57	1.08
(1,1408)	1:A:67:GLN:HA	1:A:69:ASN:H	3	0.09	0.14
(1,1392)	1:A:66:LEU:HA	1:A:67:GLN:H	3	0.06	0.09
(1,1349)	1:A:63:ASN:HB2	1:A:64:PHE:H	3	0.33	0.56
(1,1348)	1:A:63:ASN:HB2	1:A:63:ASN:HD21	3	0.02	0.03
(1,1271)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:65:ALA:H	3	0.59	0.69
(1,1261)	1:A:55:LYS:H	1:A:64:PHE:HB2	3	0.08	0.21
(1,1255)	1:A:54:PRO:HB2	1:A:64:PHE:HB2	3	0.05	0.07
(1,1231)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:55:LYS:H	3	0.09	0.19
(1,1231)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:55:LYS:H	3	0.09	0.19
(1,1231)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:55:LYS:H	3	0.09	0.19
(1,1225)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:69:ASN:HB2	3	0.15	0.27
(1,1225)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:69:ASN:HB2	3	0.15	0.27
(1,1225)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:69:ASN:HB2	3	0.15	0.27
(1,1222)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:69:ASN:HA	3	0.21	0.26
(1,1222)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:69:ASN:HA	3	0.21	0.26
(1,1222)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:69:ASN:HA	3	0.21	0.26
(1,1221)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:69:ASN:H	3	0.06	0.1
(1,1221)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:69:ASN:H	3	0.06	0.1
(1,1221)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:69:ASN:H	3	0.06	0.1
(1,1206)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:52:ILE:HD11	3	0.44	0.76
(1,1206)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:52:ILE:HD12	3	0.44	0.76
(1,1206)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:52:ILE:HD13	3	0.44	0.76
(1,1167)	1:A:49:ARG:HG2	1:A:139:PHE:HZ	3	0.43	0.95
(1,1160)	1:A:49:ARG:HA	1:A:49:ARG:HD2	3	0.2	0.3
(1,1150)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:H	3	0.73	1.48
(1,1110)	1:A:46:ARG:HA	1:A:49:ARG:HG2	3	0.23	0.35
(1,11)	1:A:19:GLY:H	1:A:16:ILE:O	3	0.12	0.17
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:140:ILE:HG21	3	0.09	0.09
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:140:ILE:HG22	3	0.09	0.09
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:140:ILE:HG23	3	0.09	0.09
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:140:ILE:HG21	3	0.09	0.09
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:140:ILE:HG22	3	0.09	0.09
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:140:ILE:HG23	3	0.09	0.09
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:140:ILE:HG21	3	0.09	0.09
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:140:ILE:HG22	3	0.09	0.09



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:140:ILE:HG23	3	0.09	0.09
(1,103)	1:A:104:GLU:H	1:A:107:GLY:O	3	0.08	0.17
(1,975)	1:A:38:TRP:H	1:A:101:LEU:HD21	2	0.04	0.05
(1,975)	1:A:38:TRP:H	1:A:101:LEU:HD22	2	0.04	0.05
(1,975)	1:A:38:TRP:H	1:A:101:LEU:HD23	2	0.04	0.05
(1,91)	1:A:97:VAL:H	1:A:85:ILE:O	2	0.05	0.06
(1,902)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:80:PRO:HB2	2	0.01	0.02
(1,902)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:80:PRO:HB2	2	0.01	0.02
(1,902)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:80:PRO:HB2	2	0.01	0.02
(1,891)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HB2	2	0.13	0.14
(1,891)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HB2	2	0.13	0.14
(1,891)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HB2	2	0.13	0.14
(1,860)	1:A:33:PRO:HB3	1:A:36:GLU:H	2	0.12	0.14
(1,83)	1:A:86:SER:H	1:A:73:ASP:O	2	0.07	0.08
(1,817)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:136:LEU:HD21	2	0.52	0.69
(1,817)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:136:LEU:HD22	2	0.52	0.69
(1,817)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:136:LEU:HD23	2	0.52	0.69
(1,81)	1:A:85:ILE:H	1:A:97:VAL:O	2	0.04	0.08
(1,803)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HD11	2	0.27	0.49
(1,803)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HD12	2	0.27	0.49
(1,803)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HD13	2	0.27	0.49
(1,768)	1:A:29:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD11	2	0.03	0.03
(1,768)	1:A:29:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD12	2	0.03	0.03
(1,768)	1:A:29:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD13	2	0.03	0.03
(1,720)	1:A:27:ARG:HE	1:A:111:GLU:HG2	2	0.17	0.18
(1,671)	1:A:26:ILE:HB	1:A:133:LEU:HD11	2	0.03	0.03
(1,671)	1:A:26:ILE:HB	1:A:133:LEU:HD12	2	0.03	0.03
(1,671)	1:A:26:ILE:HB	1:A:133:LEU:HD13	2	0.03	0.03
(1,658)	1:A:26:ILE:H	1:A:112:LEU:HD21	2	0.01	0.02
(1,658)	1:A:26:ILE:H	1:A:112:LEU:HD22	2	0.01	0.02
(1,658)	1:A:26:ILE:H	1:A:112:LEU:HD23	2	0.01	0.02
(1,638)	1:A:25:ILE:HG21	1:A:111:GLU:HB2	2	0.34	0.54
(1,638)	1:A:25:ILE:HG22	1:A:111:GLU:HB2	2	0.34	0.54
(1,638)	1:A:25:ILE:HG23	1:A:111:GLU:HB2	2	0.34	0.54
(1,632)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:113:GLU:HG2	2	0.18	0.35
(1,632)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:113:GLU:HG2	2	0.18	0.35
(1,632)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:113:GLU:HG2	2	0.18	0.35
(1,631)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:113:GLU:HB2	2	0.41	0.48
(1,631)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:113:GLU:HB2	2	0.41	0.48
(1,631)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:113:GLU:HB2	2	0.41	0.48
(1,545)	1:A:23:SER:HB2	1:A:113:GLU:HG2	2	0.68	1.05
(1,525)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:122:LEU:HD21	2	0.15	0.18



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,525)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:122:LEU:HD22	2	0.15	0.18
(1,525)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:122:LEU:HD23	2	0.15	0.18
(1,516)	1:A:22:ARG:H	1:A:22:ARG:HD2	2	0.15	0.22
(1,508)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:117:THR:HG21	2	0.09	0.11
(1,508)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:117:THR:HG22	2	0.09	0.11
(1,508)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:117:THR:HG23	2	0.09	0.11
(1,508)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:117:THR:HG21	2	0.09	0.11
(1,508)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:117:THR:HG22	2	0.09	0.11
(1,508)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:117:THR:HG23	2	0.09	0.11
(1,508)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:117:THR:HG21	2	0.09	0.11
(1,508)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:117:THR:HG22	2	0.09	0.11
(1,508)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:117:THR:HG23	2	0.09	0.11
(1,49)	1:A:48:ASN:H	1:A:44:PRO:O	2	0.02	0.03
(1,485)	1:A:18:ALA:HB1	1:A:117:THR:HG21	2	0.03	0.04
(1,485)	1:A:18:ALA:HB1	1:A:117:THR:HG22	2	0.03	0.04
(1,485)	1:A:18:ALA:HB1	1:A:117:THR:HG23	2	0.03	0.04
(1,485)	1:A:18:ALA:HB2	1:A:117:THR:HG21	2	0.03	0.04
(1,485)	1:A:18:ALA:HB2	1:A:117:THR:HG22	2	0.03	0.04
(1,485)	1:A:18:ALA:HB2	1:A:117:THR:HG23	2	0.03	0.04
(1,485)	1:A:18:ALA:HB3	1:A:117:THR:HG21	2	0.03	0.04
(1,485)	1:A:18:ALA:HB3	1:A:117:THR:HG22	2	0.03	0.04
(1,485)	1:A:18:ALA:HB3	1:A:117:THR:HG23	2	0.03	0.04
(1,45)	1:A:43:ASP:H	1:A:39:SER:O	2	0.07	0.11
(1,445)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HB	2	0.01	0.01
(1,445)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HB	2	0.01	0.01
(1,445)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HB	2	0.01	0.01
(1,424)	1:A:15:THR:HG21	1:A:21:ALA:H	2	0.02	0.02
(1,424)	1:A:15:THR:HG22	1:A:21:ALA:H	2	0.02	0.02
(1,424)	1:A:15:THR:HG23	1:A:21:ALA:H	2	0.02	0.02
(1,409)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:15:THR:H	2	0.07	0.11
(1,401)	1:A:14:ARG:HE	1:A:96:GLU:HG2	2	0.84	1.33
(1,397)	1:A:14:ARG:HB3	1:A:16:ILE:HG21	2	0.15	0.28
(1,397)	1:A:14:ARG:HB3	1:A:16:ILE:HG22	2	0.15	0.28
(1,397)	1:A:14:ARG:HB3	1:A:16:ILE:HG23	2	0.15	0.28
(1,394)	1:A:14:ARG:HB2	1:A:16:ILE:HG21	2	0.15	0.27
(1,394)	1:A:14:ARG:HB2	1:A:16:ILE:HG22	2	0.15	0.27
(1,394)	1:A:14:ARG:HB2	1:A:16:ILE:HG23	2	0.15	0.27
(1,372)	1:A:13:ARG:HA	1:A:13:ARG:HD3	2	0.2	0.21
(1,370)	1:A:13:ARG:H	1:A:25:ILE:HD11	2	0.04	0.06
(1,370)	1:A:13:ARG:H	1:A:25:ILE:HD12	2	0.04	0.06
(1,370)	1:A:13:ARG:H	1:A:25:ILE:HD13	2	0.04	0.06
(1,369)	1:A:13:ARG:H	1:A:23:SER:HG	2	0.07	0.12



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,356)	1:A:12:GLY:H	1:A:23:SER:HG	2	0.07	0.07
(1,355)	1:A:12:GLY:H	1:A:23:SER:H	2	0.04	0.06
(1,353)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:25:ILE:HA	2	0.06	0.09
(1,353)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:25:ILE:HA	2	0.06	0.09
(1,353)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:25:ILE:HA	2	0.06	0.09
(1,338)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:174:TRP:HH2	2	0.08	0.11
(1,338)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:174:TRP:HH2	2	0.08	0.11
(1,338)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:174:TRP:HH2	2	0.08	0.11
(1,332)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:181:GLY:H	2	0.15	0.19
(1,332)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:181:GLY:H	2	0.15	0.19
(1,332)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:181:GLY:H	2	0.15	0.19
(1,33)	1:A:37:VAL:H	1:A:33:PRO:O	2	0.05	0.06
(1,321)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:24:ILE:HG21	2	0.21	0.35
(1,321)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:24:ILE:HG22	2	0.21	0.35
(1,321)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:24:ILE:HG23	2	0.21	0.35
(1,304)	1:A:11:LEU:H	1:A:25:ILE:HB	2	0.07	0.09
(1,293)	1:A:10:ALA:HB1	1:A:177:LEU:HD21	2	0.09	0.13
(1,293)	1:A:10:ALA:HB1	1:A:177:LEU:HD22	2	0.09	0.13
(1,293)	1:A:10:ALA:HB1	1:A:177:LEU:HD23	2	0.09	0.13
(1,293)	1:A:10:ALA:HB2	1:A:177:LEU:HD21	2	0.09	0.13
(1,293)	1:A:10:ALA:HB2	1:A:177:LEU:HD22	2	0.09	0.13
(1,293)	1:A:10:ALA:HB2	1:A:177:LEU:HD23	2	0.09	0.13
(1,293)	1:A:10:ALA:HB3	1:A:177:LEU:HD21	2	0.09	0.13
(1,293)	1:A:10:ALA:HB3	1:A:177:LEU:HD22	2	0.09	0.13
(1,293)	1:A:10:ALA:HB3	1:A:177:LEU:HD23	2	0.09	0.13
(1,2711)	1:A:180:SER:HA	1:A:181:GLY:H	2	0.04	0.08
(1,27)	1:A:28:GLN:H	1:A:110:LEU:O	2	0.03	0.03
(1,2641)	1:A:175:ALA:HA	1:A:178:VAL:HA	2	0.05	0.05
(1,260)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:10:ALA:H	2	0.07	0.09
(1,2576)	1:A:169:GLU:HA	1:A:169:GLU:HG2	2	0.34	0.37
(1,2560)	1:A:166:ILE:HG21	1:A:170:ARG:HD2	2	0.17	0.24
(1,2560)	1:A:166:ILE:HG22	1:A:170:ARG:HD2	2	0.17	0.24
(1,2560)	1:A:166:ILE:HG23	1:A:170:ARG:HD2	2	0.17	0.24
(1,2559)	1:A:166:ILE:HG21	1:A:170:ARG:HE	2	0.05	0.07
(1,2559)	1:A:166:ILE:HG22	1:A:170:ARG:HE	2	0.05	0.07
(1,2559)	1:A:166:ILE:HG23	1:A:170:ARG:HE	2	0.05	0.07
(1,2548)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:169:GLU:HB2	2	0.04	0.06
(1,2548)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:169:GLU:HB3	2	0.04	0.06
(1,2548)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:169:GLU:HB2	2	0.04	0.06
(1,2548)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:169:GLU:HB3	2	0.04	0.06
(1,2548)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:169:GLU:HB2	2	0.04	0.06
(1,2548)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:169:GLU:HB3	2	0.04	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,2510)	1:A:164:MET:HA	1:A:167:SER:HB2	2	0.15	0.17
(1,2506)	1:A:164:MET:H	1:A:164:MET:HB2	2	0.18	0.19
(1,2476)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HE1	2	0.05	0.08
(1,2476)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HE2	2	0.05	0.08
(1,2476)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HE3	2	0.05	0.08
(1,2475)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HB2	2	0.39	0.54
(1,2461)	1:A:158:GLU:HB2	1:A:159:PRO:HD2	2	0.25	0.35
(1,2434)	1:A:154:ALA:HA	1:A:155:GLU:H	2	0.06	0.07
(1,2427)	1:A:152:ASP:HA	1:A:154:ALA:H	2	0.03	0.04
(1,2423)	1:A:152:ASP:H	1:A:152:ASP:HB2	2	0.15	0.18
(1,2388)	1:A:147:GLY:HA2	1:A:148:PRO:HD3	2	0.47	0.61
(1,2382)	1:A:145:PRO:HA	1:A:146:GLY:H	2	0.04	0.05
(1,2371)	1:A:144:LEU:H	1:A:144:LEU:HB2	2	0.13	0.14
(1,2337)	1:A:139:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HD11	2	0.58	0.67
(1,2337)	1:A:139:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HD12	2	0.58	0.67
(1,2337)	1:A:139:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HD13	2	0.58	0.67
(1,2337)	1:A:139:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HD11	2	0.58	0.67
(1,2337)	1:A:139:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HD12	2	0.58	0.67
(1,2337)	1:A:139:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HD13	2	0.58	0.67
(1,233)	1:A:8:GLU:HB2	1:A:27:ARG:HB2	2	0.04	0.04
(1,232)	1:A:8:GLU:HB2	1:A:27:ARG:H	2	0.2	0.22
(1,2312)	1:A:138:MET:HB2	1:A:144:LEU:HD11	2	0.24	0.46
(1,2312)	1:A:138:MET:HB2	1:A:144:LEU:HD12	2	0.24	0.46
(1,2312)	1:A:138:MET:HB2	1:A:144:LEU:HD13	2	0.24	0.46
(1,2311)	1:A:138:MET:HB2	1:A:144:LEU:HB2	2	1.23	1.26
(1,2310)	1:A:138:MET:HB2	1:A:144:LEU:HG	2	1.17	1.22
(1,2262)	1:A:133:LEU:HD11	1:A:136:LEU:HD11	2	0.04	0.06
(1,2262)	1:A:133:LEU:HD11	1:A:136:LEU:HD12	2	0.04	0.06
(1,2262)	1:A:133:LEU:HD11	1:A:136:LEU:HD13	2	0.04	0.06
(1,2262)	1:A:133:LEU:HD12	1:A:136:LEU:HD11	2	0.04	0.06
(1,2262)	1:A:133:LEU:HD12	1:A:136:LEU:HD12	2	0.04	0.06
(1,2262)	1:A:133:LEU:HD12	1:A:136:LEU:HD13	2	0.04	0.06
(1,2262)	1:A:133:LEU:HD13	1:A:136:LEU:HD11	2	0.04	0.06
(1,2262)	1:A:133:LEU:HD13	1:A:136:LEU:HD12	2	0.04	0.06
(1,2262)	1:A:133:LEU:HD13	1:A:136:LEU:HD13	2	0.04	0.06
(1,2219)	1:A:130:GLU:HG3	1:A:174:TRP:HE1	2	0.02	0.03
(1,2181)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:170:ARG:HB2	2	0.34	0.65
(1,2181)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:170:ARG:HB2	2	0.34	0.65
(1,2181)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:170:ARG:HB2	2	0.34	0.65
(1,2180)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:167:SER:HB2	2	0.29	0.43
(1,2180)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:167:SER:HB2	2	0.29	0.43
(1,2180)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:167:SER:HB2	2	0.29	0.43



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,218)	1:A:7:THR:HG21	1:A:28:GLN:HE21	2	0.32	0.34
(1,218)	1:A:7:THR:HG22	1:A:28:GLN:HE21	2	0.32	0.34
(1,218)	1:A:7:THR:HG23	1:A:28:GLN:HE21	2	0.32	0.34
(1,2147)	1:A:125:VAL:HB	1:A:129:TRP:HD1	2	0.02	0.02
(1,2133)	1:A:124:GLU:HA	1:A:127:VAL:HB	2	0.08	0.11
(1,207)	1:A:7:THR:HA	1:A:27:ARG:H	2	0.02	0.03
(1,2051)	1:A:120:GLN:HB3	1:A:121:MET:H	2	0.17	0.32
(1,2034)	1:A:119:GLU:HG2	1:A:122:LEU:HD11	2	0.04	0.05
(1,2034)	1:A:119:GLU:HG2	1:A:122:LEU:HD12	2	0.04	0.05
(1,2034)	1:A:119:GLU:HG2	1:A:122:LEU:HD13	2	0.04	0.05
(1,2022)	1:A:118:SER:HB2	1:A:120:GLN:H	2	0.3	0.47
(1,2004)	1:A:116:THR:HG21	1:A:122:LEU:HG	2	0.03	0.04
(1,2004)	1:A:116:THR:HG22	1:A:122:LEU:HG	2	0.03	0.04
(1,2004)	1:A:116:THR:HG23	1:A:122:LEU:HG	2	0.03	0.04
(1,1948)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:113:GLU:H	2	0.07	0.09
(1,1948)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:113:GLU:H	2	0.07	0.09
(1,1948)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:113:GLU:H	2	0.07	0.09
(1,1862)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:108:THR:HA	2	0.14	0.16
(1,186)	1:A:176:ALA:N	1:A:172:GLU:O	2	0.02	0.03
(1,1847)	1:A:103:GLU:HG2	1:A:104:GLU:H	2	0.06	0.08
(1,1821)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:110:LEU:HG	2	0.1	0.11
(1,1821)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:110:LEU:HG	2	0.1	0.11
(1,1821)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:110:LEU:HG	2	0.1	0.11
(1,182)	1:A:174:TRP:N	1:A:170:ARG:O	2	0.07	0.12
(1,1812)	1:A:101:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HA	2	0.11	0.14
(1,1812)	1:A:101:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HA	2	0.11	0.14
(1,1812)	1:A:101:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HA	2	0.11	0.14
(1,1798)	1:A:100:ARG:HG2	1:A:101:LEU:H	2	0.32	0.43
(1,1789)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:112:LEU:HD11	2	0.96	1.11
(1,1789)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:112:LEU:HD12	2	0.96	1.11
(1,1789)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:112:LEU:HD13	2	0.96	1.11
(1,1789)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:112:LEU:HD11	2	0.96	1.11
(1,1789)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:112:LEU:HD12	2	0.96	1.11
(1,1789)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:112:LEU:HD13	2	0.96	1.11
(1,1789)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:112:LEU:HD11	2	0.96	1.11
(1,1789)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:112:LEU:HD12	2	0.96	1.11
(1,1789)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:112:LEU:HD13	2	0.96	1.11
(1,176)	1:A:171:GLY:N	1:A:167:SER:O	2	0.04	0.05
(1,174)	1:A:170:ARG:N	1:A:166:ILE:O	2	0.09	0.1
(1,1737)	1:A:96:GLU:HG2	1:A:97:VAL:H	2	0.32	0.51
(1,1707)	1:A:92:LYS:H	1:A:92:LYS:HG2	2	0.36	0.52
(1,1669)	1:A:88:VAL:HG21	1:A:94:ASP:HB2	2	0.5	0.66



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1669)	1:A:88:VAL:HG22	1:A:94:ASP:HB2	2	0.5	0.66
(1,1669)	1:A:88:VAL:HG23	1:A:94:ASP:HB2	2	0.5	0.66
(1,1606)	1:A:85:ILE:H	1:A:96:GLU:HG2	2	1.23	1.29
(1,1601)	1:A:84:THR:HG21	1:A:98:GLU:HB2	2	0.57	0.93
(1,1601)	1:A:84:THR:HG22	1:A:98:GLU:HB2	2	0.57	0.93
(1,1601)	1:A:84:THR:HG23	1:A:98:GLU:HB2	2	0.57	0.93
(1,1586)	1:A:83:LEU:HD21	1:A:99:LEU:HB2	2	0.23	0.29
(1,1586)	1:A:83:LEU:HD22	1:A:99:LEU:HB2	2	0.23	0.29
(1,1586)	1:A:83:LEU:HD23	1:A:99:LEU:HB2	2	0.23	0.29
(1,1583)	1:A:83:LEU:HD11	1:A:84:THR:H	2	0.04	0.05
(1,1583)	1:A:83:LEU:HD12	1:A:84:THR:H	2	0.04	0.05
(1,1583)	1:A:83:LEU:HD13	1:A:84:THR:H	2	0.04	0.05
(1,1573)	1:A:83:LEU:H	1:A:83:LEU:HD21	2	0.07	0.11
(1,1573)	1:A:83:LEU:H	1:A:83:LEU:HD22	2	0.07	0.11
(1,1573)	1:A:83:LEU:H	1:A:83:LEU:HD23	2	0.07	0.11
(1,1543)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:82:ARG:H	2	0.13	0.17
(1,153)	1:A:138:MET:H	1:A:134:ASP:O	2	0.1	0.13
(1,1527)	1:A:77:CYS:HB2	1:A:83:LEU:HD11	2	0.63	0.75
(1,1527)	1:A:77:CYS:HB2	1:A:83:LEU:HD12	2	0.63	0.75
(1,1527)	1:A:77:CYS:HB2	1:A:83:LEU:HD13	2	0.63	0.75
(1,1473)	1:A:74:ILE:HA	1:A:85:ILE:HG21	2	0.07	0.12
(1,1473)	1:A:74:ILE:HA	1:A:85:ILE:HG22	2	0.07	0.12
(1,1473)	1:A:74:ILE:HA	1:A:85:ILE:HG23	2	0.07	0.12
(1,147)	1:A:135:PHE:H	1:A:131:MET:O	2	0.07	0.1
(1,1441)	1:A:70:ALA:HB1	1:A:89:TYR:HE1	2	0.12	0.18
(1,1441)	1:A:70:ALA:HB2	1:A:89:TYR:HE1	2	0.12	0.18
(1,1441)	1:A:70:ALA:HB3	1:A:89:TYR:HE1	2	0.12	0.18
(1,144)	1:A:133:LEU:N	1:A:129:TRP:O	2	0.04	0.06
(1,1416)	1:A:69:ASN:H	1:A:69:ASN:HB2	2	0.01	0.02
(1,1415)	1:A:68:GLY:H	1:A:69:ASN:H	2	0.05	0.05
(1,1412)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:67:GLN:HE21	2	0.03	0.04
(1,139)	1:A:131:MET:H	1:A:127:VAL:O	2	0.02	0.03
(1,1367)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:85:ILE:HB	2	0.44	0.87
(1,1366)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:72:GLY:HA2	2	0.76	1.01
(1,1337)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HG21	2	0.06	0.07
(1,1337)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HG22	2	0.06	0.07
(1,1337)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HG23	2	0.06	0.07
(1,1327)	1:A:60:GLU:HG2	1:A:61:GLY:H	2	0.14	0.21
(1,1306)	1:A:58:LEU:HB2	1:A:59:ARG:HG2	2	0.41	0.49
(1,1227)	1:A:52:ILE:HG12	1:A:53:GLU:H	2	0.05	0.08
(1,1192)	1:A:51:PHE:HZ	1:A:129:TRP:HH2	2	0.04	0.06
(1,1181)	1:A:50:TRP:HH2	1:A:133:LEU:HD21	2	0.07	0.12



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1181)	1:A:50:TRP:HH2	1:A:133:LEU:HD22	2	0.07	0.12
(1,1181)	1:A:50:TRP:HH2	1:A:133:LEU:HD23	2	0.07	0.12
(1,1174)	1:A:50:TRP:HE3	1:A:135:PHE:HB2	2	0.14	0.16
(1,1166)	1:A:49:ARG:HD2	1:A:139:PHE:HE1	2	0.45	0.55
(1,1100)	1:A:45:ASN:HB2	1:A:47:ILE:H	2	0.04	0.06
(1,1098)	1:A:45:ASN:HA	1:A:48:ASN:HD21	2	0.1	0.16
(1,1097)	1:A:45:ASN:HA	1:A:48:ASN:HD22	2	0.12	0.18
(1,1096)	1:A:45:ASN:HA	1:A:48:ASN:HD21	2	0.1	0.16
(1,1055)	1:A:41:CYS:HA	1:A:50:TRP:HZ2	2	0.04	0.06
(1,105)	1:A:109:LEU:H	1:A:102:SER:O	2	0.05	0.07
(1,1047)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:46:ARG:HD2	2	0.34	0.5
(1,1047)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:46:ARG:HD2	2	0.34	0.5
(1,1047)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:46:ARG:HD2	2	0.34	0.5
(1,1039)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:139:PHE:HZ	2	0.04	0.08
(1,1039)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:139:PHE:HZ	2	0.04	0.08
(1,1039)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:139:PHE:HZ	2	0.04	0.08
(1,1037)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:136:LEU:HD11	2	0.03	0.05
(1,1037)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:136:LEU:HD12	2	0.03	0.05
(1,1037)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:136:LEU:HD13	2	0.03	0.05
(1,1037)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:136:LEU:HD11	2	0.03	0.05
(1,1037)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:136:LEU:HD12	2	0.03	0.05
(1,1037)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:136:LEU:HD13	2	0.03	0.05
(1,1037)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:136:LEU:HD11	2	0.03	0.05
(1,1037)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:136:LEU:HD12	2	0.03	0.05
(1,1037)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:136:LEU:HD13	2	0.03	0.05
(1,1034)	1:A:40:ALA:HA	1:A:46:ARG:HD2	2	0.04	0.05
(1,1020)	1:A:39:SER:H	1:A:39:SER:HB2	2	0.1	0.11
(1,99)	1:A:101:LEU:H	1:A:81:ARG:O	1	0.04	0.04
(1,972)	1:A:37:VAL:HG21	1:A:140:ILE:HD11	1	0.02	0.02
(1,972)	1:A:37:VAL:HG21	1:A:140:ILE:HD12	1	0.02	0.02
(1,972)	1:A:37:VAL:HG21	1:A:140:ILE:HD13	1	0.02	0.02
(1,972)	1:A:37:VAL:HG22	1:A:140:ILE:HD11	1	0.02	0.02
(1,972)	1:A:37:VAL:HG22	1:A:140:ILE:HD12	1	0.02	0.02
(1,972)	1:A:37:VAL:HG22	1:A:140:ILE:HD13	1	0.02	0.02
(1,972)	1:A:37:VAL:HG23	1:A:140:ILE:HD11	1	0.02	0.02
(1,972)	1:A:37:VAL:HG23	1:A:140:ILE:HD12	1	0.02	0.02
(1,972)	1:A:37:VAL:HG23	1:A:140:ILE:HD13	1	0.02	0.02
(1,967)	1:A:37:VAL:HG21	1:A:108:THR:H	1	0.04	0.04
(1,967)	1:A:37:VAL:HG22	1:A:108:THR:H	1	0.04	0.04
(1,967)	1:A:37:VAL:HG23	1:A:108:THR:H	1	0.04	0.04
(1,95)	1:A:99:LEU:H	1:A:83:LEU:O	1	0.04	0.04
(1,911)	1:A:34:VAL:HG21	1:A:103:GLU:HG3	1	0.07	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,911)	1:A:34:VAL:HG22	1:A:103:GLU:HG3	1	0.07	0.07
(1,911)	1:A:34:VAL:HG23	1:A:103:GLU:HG3	1	0.07	0.07
(1,901)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:39:SER:H	1	0.04	0.04
(1,901)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:39:SER:H	1	0.04	0.04
(1,901)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:39:SER:H	1	0.04	0.04
(1,864)	1:A:33:PRO:HD2	1:A:36:GLU:HB2	1	0.01	0.01
(1,86)	1:A:87:TRP:N	1:A:95:SER:O	1	0.02	0.02
(1,835)	1:A:32:ALA:H	1:A:108:THR:HG1	1	0.03	0.03
(1,832)	1:A:32:ALA:H	1:A:107:GLY:HA2	1	0.08	0.08
(1,791)	1:A:30:TYR:HB3	1:A:32:ALA:HB1	1	0.02	0.02
(1,791)	1:A:30:TYR:HB3	1:A:32:ALA:HB2	1	0.02	0.02
(1,791)	1:A:30:TYR:HB3	1:A:32:ALA:HB3	1	0.02	0.02
(1,77)	1:A:83:LEU:H	1:A:99:LEU:O	1	0.02	0.02
(1,751)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HB2	1	0.08	0.08
(1,744)	1:A:28:GLN:HE22	1:A:133:LEU:HD21	1	0.05	0.05
(1,744)	1:A:28:GLN:HE22	1:A:133:LEU:HD22	1	0.05	0.05
(1,744)	1:A:28:GLN:HE22	1:A:133:LEU:HD23	1	0.05	0.05
(1,738)	1:A:28:GLN:H	1:A:28:GLN:HG2	1	0.26	0.26
(1,734)	1:A:28:GLN:H	1:A:109:LEU:HG	1	0.04	0.04
(1,733)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:111:GLU:HA	1	0.21	0.21
(1,73)	1:A:78:GLU:H	1:A:82:ARG:O	1	0.03	0.03
(1,72)	1:A:76:ARG:N	1:A:84:THR:O	1	0.03	0.03
(1,715)	1:A:27:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD11	1	0.04	0.04
(1,715)	1:A:27:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD12	1	0.04	0.04
(1,715)	1:A:27:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD13	1	0.04	0.04
(1,704)	1:A:26:ILE:HG21	1:A:28:GLN:HE22	1	0.05	0.05
(1,704)	1:A:26:ILE:HG22	1:A:28:GLN:HE22	1	0.05	0.05
(1,704)	1:A:26:ILE:HG23	1:A:28:GLN:HE22	1	0.05	0.05
(1,7)	1:A:14:ARG:H	1:A:21:ALA:O	1	0.06	0.06
(1,684)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:133:LEU:HD21	1	0.07	0.07
(1,684)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:133:LEU:HD22	1	0.07	0.07
(1,684)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:133:LEU:HD23	1	0.07	0.07
(1,684)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:133:LEU:HD21	1	0.07	0.07
(1,684)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:133:LEU:HD22	1	0.07	0.07
(1,684)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:133:LEU:HD23	1	0.07	0.07
(1,684)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:133:LEU:HD21	1	0.07	0.07
(1,684)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:133:LEU:HD22	1	0.07	0.07
(1,684)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:133:LEU:HD23	1	0.07	0.07
(1,666)	1:A:26:ILE:HB	1:A:110:LEU:HD21	1	0.03	0.03
(1,666)	1:A:26:ILE:HB	1:A:110:LEU:HD22	1	0.03	0.03
(1,666)	1:A:26:ILE:HB	1:A:110:LEU:HD23	1	0.03	0.03
(1,66)	1:A:71:SER:N	1:A:88:VAL:O	1	0.01	0.01



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,655)	1:A:26:ILE:H	1:A:111:GLU:HA	1	0.02	0.02
(1,652)	1:A:25:ILE:HG21	1:A:27:ARG:HG2	1	0.03	0.03
(1,652)	1:A:25:ILE:HG22	1:A:27:ARG:HG2	1	0.03	0.03
(1,652)	1:A:25:ILE:HG23	1:A:27:ARG:HG2	1	0.03	0.03
(1,651)	1:A:25:ILE:HG21	1:A:27:ARG:HE	1	0.05	0.05
(1,651)	1:A:25:ILE:HG22	1:A:27:ARG:HE	1	0.05	0.05
(1,651)	1:A:25:ILE:HG23	1:A:27:ARG:HE	1	0.05	0.05
(1,64)	1:A:65:ALA:N	1:A:55:LYS:O	1	0.02	0.02
(1,6)	1:A:12:GLY:N	1:A:23:SER:O	1	0.01	0.01
(1,587)	1:A:24:ILE:HD11	1:A:125:VAL:HG21	1	0.03	0.03
(1,587)	1:A:24:ILE:HD11	1:A:125:VAL:HG22	1	0.03	0.03
(1,587)	1:A:24:ILE:HD11	1:A:125:VAL:HG23	1	0.03	0.03
(1,587)	1:A:24:ILE:HD12	1:A:125:VAL:HG21	1	0.03	0.03
(1,587)	1:A:24:ILE:HD12	1:A:125:VAL:HG22	1	0.03	0.03
(1,587)	1:A:24:ILE:HD12	1:A:125:VAL:HG23	1	0.03	0.03
(1,587)	1:A:24:ILE:HD13	1:A:125:VAL:HG21	1	0.03	0.03
(1,587)	1:A:24:ILE:HD13	1:A:125:VAL:HG22	1	0.03	0.03
(1,587)	1:A:24:ILE:HD13	1:A:125:VAL:HG23	1	0.03	0.03
(1,558)	1:A:23:SER:HB2	1:A:25:ILE:HG12	1	1.1	1.1
(1,555)	1:A:23:SER:HB3	1:A:116:THR:H	1	0.13	0.13
(1,532)	1:A:22:ARG:HG2	1:A:23:SER:H	1	0.05	0.05
(1,524)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:122:LEU:HD11	1	0.1	0.1
(1,524)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:122:LEU:HD12	1	0.1	0.1
(1,524)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:122:LEU:HD13	1	0.1	0.1
(1,501)	1:A:21:ALA:HA	1:A:117:THR:HG21	1	0.06	0.06
(1,501)	1:A:21:ALA:HA	1:A:117:THR:HG22	1	0.06	0.06
(1,501)	1:A:21:ALA:HA	1:A:117:THR:HG23	1	0.06	0.06
(1,5)	1:A:12:GLY:H	1:A:23:SER:O	1	0.06	0.06
(1,487)	1:A:19:GLY:H	1:A:117:THR:HG21	1	0.01	0.01
(1,487)	1:A:19:GLY:H	1:A:117:THR:HG22	1	0.01	0.01
(1,487)	1:A:19:GLY:H	1:A:117:THR:HG23	1	0.01	0.01
(1,486)	1:A:18:ALA:HB1	1:A:19:GLY:H	1	0.02	0.02
(1,486)	1:A:18:ALA:HB2	1:A:19:GLY:H	1	0.02	0.02
(1,486)	1:A:18:ALA:HB3	1:A:19:GLY:H	1	0.02	0.02
(1,474)	1:A:16:ILE:HG21	1:A:96:GLU:HG2	1	0.02	0.02
(1,474)	1:A:16:ILE:HG22	1:A:96:GLU:HG2	1	0.02	0.02
(1,474)	1:A:16:ILE:HG23	1:A:96:GLU:HG2	1	0.02	0.02
(1,441)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:116:THR:H	1	0.08	0.08
(1,441)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:116:THR:H	1	0.08	0.08
(1,441)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:116:THR:H	1	0.08	0.08
(1,418)	1:A:15:THR:HA	1:A:20:GLU:HA	1	0.01	0.01
(1,411)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:23:SER:HB2	1	0.93	0.93



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,41)	1:A:41:CYS:H	1:A:37:VAL:O	1	0.01	0.01
(1,400)	1:A:14:ARG:HE	1:A:16:ILE:HG21	1	0.05	0.05
(1,400)	1:A:14:ARG:HE	1:A:16:ILE:HG22	1	0.05	0.05
(1,400)	1:A:14:ARG:HE	1:A:16:ILE:HG23	1	0.05	0.05
(1,40)	1:A:40:ALA:N	1:A:36:GLU:O	1	0.1	0.1
(1,380)	1:A:13:ARG:HB2	1:A:13:ARG:HE	1	0.12	0.12
(1,38)	1:A:39:SER:N	1:A:35:ASP:O	1	0.02	0.02
(1,376)	1:A:13:ARG:HA	1:A:22:ARG:HG2	1	0.07	0.07
(1,374)	1:A:13:ARG:HA	1:A:22:ARG:HA	1	0.01	0.01
(1,341)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:177:LEU:HD11	1	0.12	0.12
(1,341)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:177:LEU:HD12	1	0.12	0.12
(1,341)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:177:LEU:HD13	1	0.12	0.12
(1,341)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:177:LEU:HD11	1	0.12	0.12
(1,341)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:177:LEU:HD12	1	0.12	0.12
(1,341)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:177:LEU:HD13	1	0.12	0.12
(1,341)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:177:LEU:HD11	1	0.12	0.12
(1,341)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:177:LEU:HD12	1	0.12	0.12
(1,341)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:177:LEU:HD13	1	0.12	0.12
(1,340)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:177:LEU:HB2	1	0.01	0.01
(1,340)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:177:LEU:HB2	1	0.01	0.01
(1,340)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:177:LEU:HB2	1	0.01	0.01
(1,334)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:22:ARG:HE	1	0.03	0.03
(1,334)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:22:ARG:HE	1	0.03	0.03
(1,334)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:22:ARG:HE	1	0.03	0.03
(1,330)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:178:VAL:HG21	1	0.04	0.04
(1,330)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:178:VAL:HG22	1	0.04	0.04
(1,330)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:178:VAL:HG23	1	0.04	0.04
(1,330)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:178:VAL:HG21	1	0.04	0.04
(1,330)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:178:VAL:HG22	1	0.04	0.04
(1,330)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:178:VAL:HG23	1	0.04	0.04
(1,330)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:178:VAL:HG21	1	0.04	0.04
(1,330)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:178:VAL:HG22	1	0.04	0.04
(1,330)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:178:VAL:HG23	1	0.04	0.04
(1,319)	1:A:11:LEU:HG	1:A:178:VAL:HA	1	0.01	0.01
(1,303)	1:A:11:LEU:H	1:A:177:LEU:HD21	1	0.07	0.07
(1,303)	1:A:11:LEU:H	1:A:177:LEU:HD22	1	0.07	0.07
(1,303)	1:A:11:LEU:H	1:A:177:LEU:HD23	1	0.07	0.07
(1,302)	1:A:11:LEU:H	1:A:177:LEU:HD11	1	0.05	0.05
(1,302)	1:A:11:LEU:H	1:A:177:LEU:HD12	1	0.05	0.05
(1,302)	1:A:11:LEU:H	1:A:177:LEU:HD13	1	0.05	0.05
(1,2702)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB2	1	0.18	0.18
(1,2690)	1:A:178:VAL:H	1:A:179:HIS:HB2	1	0.04	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,2683)	1:A:177:LEU:HD11	1:A:178:VAL:H	1	0.02	0.02
(1,2683)	1:A:177:LEU:HD12	1:A:178:VAL:H	1	0.02	0.02
(1,2683)	1:A:177:LEU:HD13	1:A:178:VAL:H	1	0.02	0.02
(1,2682)	1:A:177:LEU:HB2	1:A:178:VAL:HG21	1	0.07	0.07
(1,2682)	1:A:177:LEU:HB2	1:A:178:VAL:HG22	1	0.07	0.07
(1,2682)	1:A:177:LEU:HB2	1:A:178:VAL:HG23	1	0.07	0.07
(1,2658)	1:A:176:ALA:HA	1:A:179:HIS:HB2	1	0.32	0.32
(1,2656)	1:A:176:ALA:H	1:A:179:HIS:HB2	1	1.43	1.43
(1,264)	1:A:9:ARG:HB2	1:A:177:LEU:HD21	1	1.03	1.03
(1,264)	1:A:9:ARG:HB2	1:A:177:LEU:HD22	1	1.03	1.03
(1,264)	1:A:9:ARG:HB2	1:A:177:LEU:HD23	1	1.03	1.03
(1,2589)	1:A:170:ARG:HB2	1:A:174:TRP:HD1	1	0.09	0.09
(1,2586)	1:A:170:ARG:HA	1:A:173:ALA:HB1	1	0.04	0.04
(1,2586)	1:A:170:ARG:HA	1:A:173:ALA:HB2	1	0.04	0.04
(1,2586)	1:A:170:ARG:HA	1:A:173:ALA:HB3	1	0.04	0.04
(1,2584)	1:A:170:ARG:HA	1:A:170:ARG:HE	1	0.18	0.18
(1,258)	1:A:9:ARG:HE	1:A:174:TRP:HE1	1	0.01	0.01
(1,2566)	1:A:168:GLN:HA	1:A:168:GLN:HE21	1	0.05	0.05
(1,2558)	1:A:166:ILE:HG21	1:A:169:GLU:HB2	1	0.08	0.08
(1,2558)	1:A:166:ILE:HG21	1:A:169:GLU:HB3	1	0.08	0.08
(1,2558)	1:A:166:ILE:HG22	1:A:169:GLU:HB2	1	0.08	0.08
(1,2558)	1:A:166:ILE:HG22	1:A:169:GLU:HB3	1	0.08	0.08
(1,2558)	1:A:166:ILE:HG23	1:A:169:GLU:HB2	1	0.08	0.08
(1,2558)	1:A:166:ILE:HG23	1:A:169:GLU:HB3	1	0.08	0.08
(1,2525)	1:A:165:ARG:HA	1:A:168:GLN:HE21	1	0.08	0.08
(1,2519)	1:A:165:ARG:H	1:A:165:ARG:HB2	1	0.19	0.19
(1,2481)	1:A:162:GLU:H	1:A:162:GLU:HB2	1	0.14	0.14
(1,2444)	1:A:156:GLU:H	1:A:156:GLU:HG2	1	0.26	0.26
(1,2428)	1:A:152:ASP:HA	1:A:154:ALA:HB1	1	0.14	0.14
(1,2428)	1:A:152:ASP:HA	1:A:154:ALA:HB2	1	0.14	0.14
(1,2428)	1:A:152:ASP:HA	1:A:154:ALA:HB3	1	0.14	0.14
(1,2425)	1:A:152:ASP:HA	1:A:153:ALA:H	1	0.02	0.02
(1,24)	1:A:26:ILE:N	1:A:112:LEU:O	1	0.01	0.01
(1,238)	1:A:8:GLU:HB2	1:A:27:ARG:HD2	1	0.39	0.39
(1,2379)	1:A:144:LEU:HA	1:A:145:PRO:HD2	1	0.41	0.41
(1,2355)	1:A:141:ARG:H	1:A:143:ASP:H	1	0.08	0.08
(1,2353)	1:A:141:ARG:H	1:A:141:ARG:HG2	1	0.19	0.19
(1,2351)	1:A:141:ARG:H	1:A:141:ARG:HB2	1	0.18	0.18
(1,2345)	1:A:140:ILE:HB	1:A:141:ARG:H	1	0.27	0.27
(1,2344)	1:A:140:ILE:HA	1:A:142:GLY:H	1	0.05	0.05
(1,2334)	1:A:139:PHE:HD1	1:A:140:ILE:HG12	1	0.87	0.87
(1,2334)	1:A:139:PHE:HD2	1:A:140:ILE:HG12	1	0.87	0.87



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,2327)	1:A:139:PHE:HA	1:A:144:LEU:HD11	1	0.14	0.14
(1,2327)	1:A:139:PHE:HA	1:A:144:LEU:HD12	1	0.14	0.14
(1,2327)	1:A:139:PHE:HA	1:A:144:LEU:HD13	1	0.14	0.14
(1,2326)	1:A:139:PHE:HA	1:A:144:LEU:HD21	1	0.03	0.03
(1,2326)	1:A:139:PHE:HA	1:A:144:LEU:HD22	1	0.03	0.03
(1,2326)	1:A:139:PHE:HA	1:A:144:LEU:HD23	1	0.03	0.03
(1,2325)	1:A:139:PHE:HA	1:A:144:LEU:HD11	1	0.14	0.14
(1,2325)	1:A:139:PHE:HA	1:A:144:LEU:HD12	1	0.14	0.14
(1,2325)	1:A:139:PHE:HA	1:A:144:LEU:HD13	1	0.14	0.14
(1,2323)	1:A:139:PHE:HA	1:A:144:LEU:HB3	1	0.21	0.21
(1,2322)	1:A:139:PHE:HA	1:A:144:LEU:HB2	1	0.07	0.07
(1,2317)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD21	1	0.15	0.15
(1,2317)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD22	1	0.15	0.15
(1,2317)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD23	1	0.15	0.15
(1,2317)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD21	1	0.15	0.15
(1,2317)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD22	1	0.15	0.15
(1,2317)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD23	1	0.15	0.15
(1,2317)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD21	1	0.15	0.15
(1,2317)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD22	1	0.15	0.15
(1,2317)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD23	1	0.15	0.15
(1,23)	1:A:26:ILE:H	1:A:112:LEU:O	1	0.07	0.07
(1,2284)	1:A:136:LEU:HB2	1:A:139:PHE:HB2	1	0.08	0.08
(1,2283)	1:A:136:LEU:HG	1:A:140:ILE:HG12	1	1.06	1.06
(1,2275)	1:A:135:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HD21	1	0.15	0.15
(1,2275)	1:A:135:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HD22	1	0.15	0.15
(1,2275)	1:A:135:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HD23	1	0.15	0.15
(1,2275)	1:A:135:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HD21	1	0.15	0.15
(1,2275)	1:A:135:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HD22	1	0.15	0.15
(1,2275)	1:A:135:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HD23	1	0.15	0.15
(1,2274)	1:A:135:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HD11	1	0.17	0.17
(1,2274)	1:A:135:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HD12	1	0.17	0.17
(1,2274)	1:A:135:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HD13	1	0.17	0.17
(1,2274)	1:A:135:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HD11	1	0.17	0.17
(1,2274)	1:A:135:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HD12	1	0.17	0.17
(1,2274)	1:A:135:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HD13	1	0.17	0.17
(1,2263)	1:A:133:LEU:HD11	1:A:136:LEU:HD21	1	0.05	0.05
(1,2263)	1:A:133:LEU:HD11	1:A:136:LEU:HD22	1	0.05	0.05
(1,2263)	1:A:133:LEU:HD11	1:A:136:LEU:HD23	1	0.05	0.05
(1,2263)	1:A:133:LEU:HD12	1:A:136:LEU:HD21	1	0.05	0.05
(1,2263)	1:A:133:LEU:HD12	1:A:136:LEU:HD22	1	0.05	0.05
(1,2263)	1:A:133:LEU:HD12	1:A:136:LEU:HD23	1	0.05	0.05
(1,2263)	1:A:133:LEU:HD13	1:A:136:LEU:HD21	1	0.05	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,2263)	1:A:133:LEU:HD13	1:A:136:LEU:HD22	1	0.05	0.05
(1,2263)	1:A:133:LEU:HD13	1:A:136:LEU:HD23	1	0.05	0.05
(1,2241)	1:A:132:ALA:HB1	1:A:135:PHE:HD1	1	0.15	0.15
(1,2241)	1:A:132:ALA:HB1	1:A:135:PHE:HD2	1	0.15	0.15
(1,2241)	1:A:132:ALA:HB2	1:A:135:PHE:HD1	1	0.15	0.15
(1,2241)	1:A:132:ALA:HB2	1:A:135:PHE:HD2	1	0.15	0.15
(1,2241)	1:A:132:ALA:HB3	1:A:135:PHE:HD1	1	0.15	0.15
(1,2241)	1:A:132:ALA:HB3	1:A:135:PHE:HD2	1	0.15	0.15
(1,223)	1:A:8:GLU:H	1:A:26:ILE:HG21	1	0.01	0.01
(1,223)	1:A:8:GLU:H	1:A:26:ILE:HG22	1	0.01	0.01
(1,223)	1:A:8:GLU:H	1:A:26:ILE:HG23	1	0.01	0.01
(1,2107)	1:A:123:VAL:HG11	1:A:126:GLY:H	1	0.06	0.06
(1,2107)	1:A:123:VAL:HG12	1:A:126:GLY:H	1	0.06	0.06
(1,2107)	1:A:123:VAL:HG13	1:A:126:GLY:H	1	0.06	0.06
(1,21)	1:A:25:ILE:H	1:A:10:ALA:O	1	0.05	0.05
(1,2094)	1:A:122:LEU:HD21	1:A:125:VAL:HB	1	0.01	0.01
(1,2094)	1:A:122:LEU:HD22	1:A:125:VAL:HB	1	0.01	0.01
(1,2094)	1:A:122:LEU:HD23	1:A:125:VAL:HB	1	0.01	0.01
(1,2060)	1:A:121:MET:HA	1:A:124:GLU:HG2	1	0.09	0.09
(1,2054)	1:A:120:GLN:HG2	1:A:121:MET:H	1	0.01	0.01
(1,2048)	1:A:120:GLN:HA	1:A:120:GLN:HG2	1	0.22	0.22
(1,2043)	1:A:120:GLN:H	1:A:120:GLN:HB2	1	0.11	0.11
(1,2036)	1:A:119:GLU:HG3	1:A:122:LEU:HD11	1	0.22	0.22
(1,2036)	1:A:119:GLU:HG3	1:A:122:LEU:HD12	1	0.22	0.22
(1,2036)	1:A:119:GLU:HG3	1:A:122:LEU:HD13	1	0.22	0.22
(1,2025)	1:A:119:GLU:H	1:A:119:GLU:HB2	1	0.12	0.12
(1,2014)	1:A:118:SER:H	1:A:118:SER:HB2	1	0.13	0.13
(1,201)	1:A:6:ALA:H	1:A:29:ARG:H	1	0.06	0.06
(1,1998)	1:A:116:THR:HG21	1:A:121:MET:H	1	0.01	0.01
(1,1998)	1:A:116:THR:HG22	1:A:121:MET:H	1	0.01	0.01
(1,1998)	1:A:116:THR:HG23	1:A:121:MET:H	1	0.01	0.01
(1,1996)	1:A:116:THR:HG21	1:A:118:SER:H	1	0.03	0.03
(1,1996)	1:A:116:THR:HG22	1:A:118:SER:H	1	0.03	0.03
(1,1996)	1:A:116:THR:HG23	1:A:118:SER:H	1	0.03	0.03
(1,199)	1:A:5:GLN:HG2	1:A:5:GLN:HE21	1	0.04	0.04
(1,1959)	1:A:113:GLU:HG2	1:A:114:HIS:H	1	0.36	0.36
(1,1957)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:133:LEU:HD21	1	0.02	0.02
(1,1957)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:133:LEU:HD22	1	0.02	0.02
(1,1957)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:133:LEU:HD23	1	0.02	0.02
(1,1957)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:133:LEU:HD21	1	0.02	0.02
(1,1957)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:133:LEU:HD22	1	0.02	0.02
(1,1957)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:133:LEU:HD23	1	0.02	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1957)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HD21	1	0.02	0.02
(1,1957)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HD22	1	0.02	0.02
(1,1957)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HD23	1	0.02	0.02
(1,1920)	1:A:110:LEU:HG	1:A:136:LEU:HD21	1	0.06	0.06
(1,1920)	1:A:110:LEU:HG	1:A:136:LEU:HD22	1	0.06	0.06
(1,1920)	1:A:110:LEU:HG	1:A:136:LEU:HD23	1	0.06	0.06
(1,1918)	1:A:110:LEU:HG	1:A:111:GLU:H	1	0.19	0.19
(1,1913)	1:A:110:LEU:H	1:A:110:LEU:HB2	1	0.46	0.46
(1,19)	1:A:24:ILE:H	1:A:114:HIS:O	1	0.09	0.09
(1,1877)	1:A:106:ASP:HA	1:A:107:GLY:H	1	0.1	0.1
(1,1875)	1:A:106:ASP:H	1:A:106:ASP:HB2	1	0.33	0.33
(1,1837)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:HB3	1	0.1	0.1
(1,1782)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:101:LEU:HG	1	0.07	0.07
(1,1782)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:101:LEU:HG	1	0.07	0.07
(1,1782)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:101:LEU:HG	1	0.07	0.07
(1,1780)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:100:ARG:H	1	0.05	0.05
(1,1780)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:100:ARG:H	1	0.05	0.05
(1,1780)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:100:ARG:H	1	0.05	0.05
(1,178)	1:A:172:GLU:N	1:A:168:GLN:O	1	0.04	0.04
(1,1777)	1:A:99:LEU:HG	1:A:112:LEU:HD11	1	0.02	0.02
(1,1777)	1:A:99:LEU:HG	1:A:112:LEU:HD12	1	0.02	0.02
(1,1777)	1:A:99:LEU:HG	1:A:112:LEU:HD13	1	0.02	0.02
(1,1770)	1:A:99:LEU:HA	1:A:112:LEU:HG	1	0.04	0.04
(1,1716)	1:A:92:LYS:HG2	1:A:121:MET:HE1	1	0.2	0.2
(1,1716)	1:A:92:LYS:HG2	1:A:121:MET:HE2	1	0.2	0.2
(1,1716)	1:A:92:LYS:HG2	1:A:121:MET:HE3	1	0.2	0.2
(1,1713)	1:A:92:LYS:HB2	1:A:93:PRO:HD2	1	0.02	0.02
(1,171)	1:A:169:GLU:H	1:A:165:ARG:O	1	0.03	0.03
(1,1704)	1:A:91:GLY:H	1:A:92:LYS:H	1	0.1	0.1
(1,17)	1:A:23:SER:H	1:A:12:GLY:O	1	0.02	0.02
(1,1698)	1:A:90:GLU:HA	1:A:92:LYS:H	1	0.1	0.1
(1,1683)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:90:GLU:H	1	0.17	0.17
(1,168)	1:A:167:SER:N	1:A:163:MET:O	1	0.11	0.11
(1,1666)	1:A:88:VAL:HG11	1:A:94:ASP:HA	1	0.08	0.08
(1,1666)	1:A:88:VAL:HG12	1:A:94:ASP:HA	1	0.08	0.08
(1,1666)	1:A:88:VAL:HG13	1:A:94:ASP:HA	1	0.08	0.08
(1,166)	1:A:166:ILE:N	1:A:162:GLU:O	1	0.03	0.03
(1,1646)	1:A:87:TRP:HE1	1:A:89:TYR:HB2	1	0.02	0.02
(1,164)	1:A:165:ARG:N	1:A:161:PRO:O	1	0.05	0.05
(1,1622)	1:A:85:ILE:HG12	1:A:97:VAL:H	1	0.51	0.51
(1,1620)	1:A:85:ILE:HD11	1:A:99:LEU:H	1	0.07	0.07
(1,1620)	1:A:85:ILE:HD12	1:A:99:LEU:H	1	0.07	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1620)	1:A:85:ILE:HD13	1:A:99:LEU:H	1	0.07	0.07
(1,161)	1:A:164:MET:H	1:A:160:SER:O	1	0.02	0.02
(1,1597)	1:A:84:THR:HG21	1:A:96:GLU:HG3	1	0.19	0.19
(1,1597)	1:A:84:THR:HG22	1:A:96:GLU:HG3	1	0.19	0.19
(1,1597)	1:A:84:THR:HG23	1:A:96:GLU:HG3	1	0.19	0.19
(1,1585)	1:A:83:LEU:HD21	1:A:99:LEU:H	1	0.07	0.07
(1,1585)	1:A:83:LEU:HD22	1:A:99:LEU:H	1	0.07	0.07
(1,1585)	1:A:83:LEU:HD23	1:A:99:LEU:H	1	0.07	0.07
(1,1566)	1:A:82:ARG:HB2	1:A:100:ARG:HA	1	0.39	0.39
(1,1564)	1:A:82:ARG:HB2	1:A:99:LEU:H	1	0.01	0.01
(1,154)	1:A:138:MET:N	1:A:134:ASP:O	1	0.07	0.07
(1,1536)	1:A:78:GLU:H	1:A:83:LEU:HD11	1	0.07	0.07
(1,1536)	1:A:78:GLU:H	1:A:83:LEU:HD12	1	0.07	0.07
(1,1536)	1:A:78:GLU:H	1:A:83:LEU:HD13	1	0.07	0.07
(1,1520)	1:A:76:ARG:HD2	1:A:77:CYS:H	1	0.52	0.52
(1,1519)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:84:THR:HB	1	0.32	0.32
(1,1516)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HE	1	0.11	0.11
(1,1513)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HD2	1	0.62	0.62
(1,1508)	1:A:76:ARG:H	1:A:76:ARG:HG2	1	0.15	0.15
(1,1503)	1:A:75:LEU:HD11	1:A:96:GLU:HG2	1	0.04	0.04
(1,1503)	1:A:75:LEU:HD12	1:A:96:GLU:HG2	1	0.04	0.04
(1,1503)	1:A:75:LEU:HD13	1:A:96:GLU:HG2	1	0.04	0.04
(1,1501)	1:A:75:LEU:HD11	1:A:86:SER:HA	1	0.03	0.03
(1,1501)	1:A:75:LEU:HD12	1:A:86:SER:HA	1	0.03	0.03
(1,1501)	1:A:75:LEU:HD13	1:A:86:SER:HA	1	0.03	0.03
(1,1498)	1:A:75:LEU:HD11	1:A:84:THR:HG21	1	0.07	0.07
(1,1498)	1:A:75:LEU:HD11	1:A:84:THR:HG22	1	0.07	0.07
(1,1498)	1:A:75:LEU:HD11	1:A:84:THR:HG23	1	0.07	0.07
(1,1498)	1:A:75:LEU:HD12	1:A:84:THR:HG21	1	0.07	0.07
(1,1498)	1:A:75:LEU:HD12	1:A:84:THR:HG22	1	0.07	0.07
(1,1498)	1:A:75:LEU:HD12	1:A:84:THR:HG23	1	0.07	0.07
(1,1498)	1:A:75:LEU:HD13	1:A:84:THR:HG21	1	0.07	0.07
(1,1498)	1:A:75:LEU:HD13	1:A:84:THR:HG22	1	0.07	0.07
(1,1498)	1:A:75:LEU:HD13	1:A:84:THR:HG23	1	0.07	0.07
(1,1495)	1:A:75:LEU:HB2	1:A:84:THR:HB	1	0.25	0.25
(1,1488)	1:A:75:LEU:HA	1:A:75:LEU:HD21	1	0.08	0.08
(1,1488)	1:A:75:LEU:HA	1:A:75:LEU:HD22	1	0.08	0.08
(1,1488)	1:A:75:LEU:HA	1:A:75:LEU:HD23	1	0.08	0.08
(1,148)	1:A:135:PHE:N	1:A:131:MET:O	1	0.04	0.04
(1,1475)	1:A:74:ILE:HD11	1:A:75:LEU:H	1	0.17	0.17
(1,1475)	1:A:74:ILE:HD12	1:A:75:LEU:H	1	0.17	0.17
(1,1475)	1:A:74:ILE:HD13	1:A:75:LEU:H	1	0.17	0.17



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1461)	1:A:73:ASP:H	1:A:88:VAL:HG21	1	0.03	0.03
(1,1461)	1:A:73:ASP:H	1:A:88:VAL:HG22	1	0.03	0.03
(1,1461)	1:A:73:ASP:H	1:A:88:VAL:HG23	1	0.03	0.03
(1,1457)	1:A:73:ASP:H	1:A:74:ILE:HD11	1	0.11	0.11
(1,1457)	1:A:73:ASP:H	1:A:74:ILE:HD12	1	0.11	0.11
(1,1457)	1:A:73:ASP:H	1:A:74:ILE:HD13	1	0.11	0.11
(1,1405)	1:A:67:GLN:H	1:A:68:GLY:H	1	0.04	0.04
(1,1404)	1:A:67:GLN:H	1:A:67:GLN:HG2	1	0.61	0.61
(1,1403)	1:A:67:GLN:H	1:A:67:GLN:HB2	1	0.21	0.21
(1,1395)	1:A:66:LEU:HB2	1:A:70:ALA:H	1	0.18	0.18
(1,1374)	1:A:65:ALA:HA	1:A:71:SER:HA	1	0.12	0.12
(1,1370)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:86:SER:H	1	0.52	0.52
(1,1369)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:85:ILE:HG21	1	1.1	1.1
(1,1369)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:85:ILE:HG22	1	1.1	1.1
(1,1369)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:85:ILE:HG23	1	1.1	1.1
(1,1350)	1:A:63:ASN:HB2	1:A:72:GLY:H	1	0.13	0.13
(1,1334)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:H	1	0.02	0.02
(1,133)	1:A:128:GLY:H	1:A:124:GLU:O	1	0.03	0.03
(1,132)	1:A:127:VAL:N	1:A:123:VAL:O	1	0.03	0.03
(1,1317)	1:A:59:ARG:H	1:A:74:ILE:HG21	1	0.12	0.12
(1,1317)	1:A:59:ARG:H	1:A:74:ILE:HG22	1	0.12	0.12
(1,1317)	1:A:59:ARG:H	1:A:74:ILE:HG23	1	0.12	0.12
(1,1316)	1:A:59:ARG:H	1:A:74:ILE:HG12	1	0.28	0.28
(1,1314)	1:A:59:ARG:H	1:A:63:ASN:H	1	0.14	0.14
(1,129)	1:A:126:GLY:H	1:A:122:LEU:O	1	0.06	0.06
(1,1287)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:65:ALA:H	1	0.07	0.07
(1,1284)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:58:LEU:HD21	1	0.25	0.25
(1,1284)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:58:LEU:HD22	1	0.25	0.25
(1,1284)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:58:LEU:HD23	1	0.25	0.25
(1,1272)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:65:ALA:HB1	1	0.59	0.59
(1,1272)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:65:ALA:HB2	1	0.59	0.59
(1,1272)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:65:ALA:HB3	1	0.59	0.59
(1,1260)	1:A:55:LYS:H	1:A:64:PHE:HA	1	0.04	0.04
(1,126)	1:A:124:GLU:N	1:A:120:GLN:O	1	0.09	0.09
(1,1258)	1:A:55:LYS:H	1:A:55:LYS:HG2	1	0.1	0.1
(1,1257)	1:A:55:LYS:H	1:A:55:LYS:HB2	1	0.49	0.49
(1,1230)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:53:GLU:H	1	0.05	0.05
(1,1230)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:53:GLU:H	1	0.05	0.05
(1,1230)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:53:GLU:H	1	0.05	0.05
(1,1218)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:66:LEU:HD11	1	0.02	0.02
(1,1218)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:66:LEU:HD12	1	0.02	0.02
(1,1218)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:66:LEU:HD13	1	0.02	0.02



Continued from previous page...

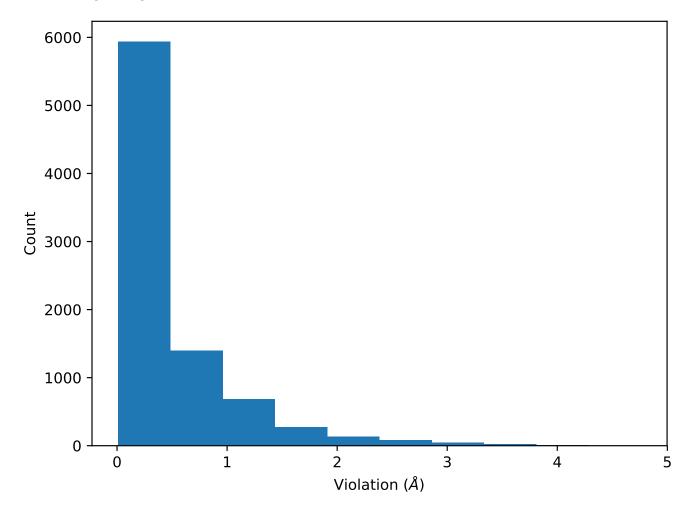
Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1218)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:66:LEU:HD11	1	0.02	0.02
(1,1218)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:66:LEU:HD12	1	0.02	0.02
(1,1218)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:66:LEU:HD13	1	0.02	0.02
(1,1218)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:66:LEU:HD11	1	0.02	0.02
(1,1218)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:66:LEU:HD12	1	0.02	0.02
(1,1218)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:66:LEU:HD13	1	0.02	0.02
(1,121)	1:A:122:LEU:H	1:A:118:SER:O	1	0.01	0.01
(1,1198)	1:A:51:PHE:HD1	1:A:52:ILE:HD11	1	0.05	0.05
(1,1198)	1:A:51:PHE:HD1	1:A:52:ILE:HD12	1	0.05	0.05
(1,1198)	1:A:51:PHE:HD1	1:A:52:ILE:HD13	1	0.05	0.05
(1,1198)	1:A:51:PHE:HD2	1:A:52:ILE:HD11	1	0.05	0.05
(1,1198)	1:A:51:PHE:HD2	1:A:52:ILE:HD12	1	0.05	0.05
(1,1198)	1:A:51:PHE:HD2	1:A:52:ILE:HD13	1	0.05	0.05
(1,1188)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:136:LEU:HB2	1	0.08	0.08
(1,1180)	1:A:50:TRP:HH2	1:A:133:LEU:HD11	1	0.01	0.01
(1,1180)	1:A:50:TRP:HH2	1:A:133:LEU:HD12	1	0.01	0.01
(1,1180)	1:A:50:TRP:HH2	1:A:133:LEU:HD13	1	0.01	0.01
(1,1173)	1:A:50:TRP:HE3	1:A:132:ALA:HB1	1	0.06	0.06
(1,1173)	1:A:50:TRP:HE3	1:A:132:ALA:HB2	1	0.06	0.06
(1,1173)	1:A:50:TRP:HE3	1:A:132:ALA:HB3	1	0.06	0.06
(1,1164)	1:A:49:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HE1	1	0.1	0.1
(1,1163)	1:A:49:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HD1	1	0.37	0.37
(1,1163)	1:A:49:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HD2	1	0.37	0.37
(1,1147)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:54:PRO:HD3	1	0.01	0.01
(1,1147)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:54:PRO:HD3	1	0.01	0.01
(1,1147)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:54:PRO:HD3	1	0.01	0.01
(1,1127)	1:A:47:ILE:H	1:A:54:PRO:HD2	1	0.08	0.08
(1,1120)	1:A:46:ARG:HG2	1:A:139:PHE:HZ	1	0.58	0.58
(1,1117)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:47:ILE:HG12	1	0.23	0.23
(1,1071)	1:A:43:ASP:HB2	1:A:46:ARG:HB2	1	0.37	0.37
(1,1060)	1:A:42:THR:H	1:A:43:ASP:HB2	1	0.87	0.87
(1,1035)	1:A:40:ALA:HA	1:A:46:ARG:HD3	1	0.06	0.06
(1,1012)	1:A:38:TRP:HZ2	1:A:79:PRO:HB2	1	0.04	0.04
(1,1009)	1:A:38:TRP:HH2	1:A:83:LEU:HD21	1	0.01	0.01
(1,1009)	1:A:38:TRP:HH2	1:A:83:LEU:HD22	1	0.01	0.01
(1,1009)	1:A:38:TRP:HH2	1:A:83:LEU:HD23	1	0.01	0.01



## 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)
(1,1688)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HG2	9	4.76
(1,1691)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HE2	11	4.75
(1,802)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HB2	10	4.38
(1,1692)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HG2	9	4.23
(1,1691)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HE2	20	4.23
(1,1687)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HE2	20	4.08
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	4	4.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,800)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HA	10	3.98
(1,1119)	1:A:46:ARG:HD2	1:A:139:PHE:HE1	11	3.94
(1,1691)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HE2	8	3.93
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	13	3.9
(1,813)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HB2	10	3.89
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	5	3.86
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	11	3.86
(1,1686)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HD2	20	3.8
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	1	3.78
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	8	3.78
(1,1687)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HE2	11	3.78
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	3	3.7
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	17	3.66
(1,1687)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HE2	8	3.62
(1,1119)	1:A:46:ARG:HD2	1:A:139:PHE:HE1	18	3.62
(1,798)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:109:LEU:HA	17	3.57
(1,812)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HG	4	3.52
(1,812)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HG	1	3.51
(1,1686)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HD2	4	3.48
(1,1691)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HE2	9	3.47
(1,812)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HG	13	3.46
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	16	3.45
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	9	3.44
(1,812)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HG	8	3.42
(1,1691)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HE2	15	3.41
(1,1114)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HE1	11	3.4
(1,812)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HG	11	3.38
(1,1688)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HG2	20	3.38
(1,1119)	1:A:46:ARG:HD2	1:A:139:PHE:HE1	4	3.3
(1,811)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:H	9	3.26
(1,798)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:109:LEU:HA	1	3.26
(1,798)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:109:LEU:HA	13	3.24
(1,812)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HG	17	3.22
(1,800)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HA	13	3.22
(1,798)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:109:LEU:HA	8	3.22
(1,798)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:109:LEU:HA	9	3.22
(1,812)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HG	5	3.21
(1,800)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HA	4	3.2
(1,800)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HA	11	3.17
(1,1686)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HD2	2	3.12
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD11	10	3.11
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD12	10	3.11



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD13	10	3.11
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD11	1	3.09
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD12	1	3.09
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD13	1	3.09
(1,1686)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HD2	15	3.09
(1,750)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HE1	17	3.08
(1,1686)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HD2	18	3.07
(1,811)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:H	10	3.03
(1,800)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HA	8	3.03
(1,798)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:109:LEU:HA	4	3.02
(1,800)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HA	1	3.01
(1,750)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HE1	16	3.01
(1,1119)	1:A:46:ARG:HD2	1:A:139:PHE:HE1	9	3.0
(1,800)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HA	17	2.98
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD11	11	2.98
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD12	11	2.98
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD13	11	2.98
(1,1688)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HG2	1	2.97
(1,799)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:H	9	2.96
(1,1687)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HE2	15	2.96
(1,1686)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HD2	16	2.96
(1,811)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:H	16	2.94
(1,750)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HE1	5	2.93
(1,812)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HG	3	2.92
(1,799)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:H	10	2.9
(1,750)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HE1	8	2.9
(1,811)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:H	13	2.87
(1,800)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HA	9	2.87
(1,812)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HG	9	2.86
(1,811)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:H	8	2.86
(1,800)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HA	3	2.85
(1,1114)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HE1	18	2.85
(1,811)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:H	17	2.84
(1,800)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HA	16	2.83
(1,798)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:109:LEU:HA	16	2.83
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	10	2.83
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	10	2.83
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	10	2.83
(1,800)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HA	5	2.82
(1,811)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:H	5	2.81
(1,1686)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HD2	5	2.81
(1,811)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:H	4	2.79



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,750)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HE1	4	2.79
(1,1686)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HD2	13	2.79
(1,812)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HG	16	2.77
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD11	19	2.77
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD12	19	2.77
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD13	19	2.77
(1,811)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:H	1	2.75
(1,799)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:H	16	2.74
(1,1121)	1:A:46:ARG:HG2	1:A:139:PHE:HE1	2	2.74
(1,798)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:109:LEU:HA	10	2.73
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD11	4	2.72
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD12	4	2.72
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD13	4	2.72
(1,1686)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HD2	1	2.72
(1,1320)	1:A:59:ARG:HG2	1:A:62:GLY:HA2	11	2.72
(1,1691)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HE2	16	2.7
(1,1320)	1:A:59:ARG:HG2	1:A:62:GLY:HA2	5	2.7
(1,798)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:109:LEU:HA	3	2.68
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG21	10	2.68
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG22	10	2.68
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG23	10	2.68
(1,811)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:H	11	2.67
(1,1688)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HG2	15	2.67
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD11	13	2.66
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD12	13	2.66
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD13	13	2.66
(1,798)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:109:LEU:HA	5	2.65
(1,1114)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HE1	2	2.64
(1,818)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:137:GLY:HA2	6	2.61
(1,1320)	1:A:59:ARG:HG2	1:A:62:GLY:HA2	12	2.61
(1,1114)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HE1	20	2.61
(1,1569)	1:A:82:ARG:HD2	1:A:100:ARG:HB2	11	2.58
(1,749)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HD1	16	2.56
(1,1691)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HE2	4	2.56
(1,1686)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HD2	19	2.56
(1,799)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:H	11	2.55
(1,798)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:109:LEU:HA	11	2.55
(1,799)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:H	13	2.54
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD11	17	2.53
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD12	17	2.53
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD13	17	2.53
(1,1688)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HG2	8	2.53



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1687)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HE2	4	2.51
(1,1320)	1:A:59:ARG:HG2	1:A:62:GLY:HA2	20	2.51
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD11	8	2.5
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD12	8	2.5
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD13	8	2.5
(1,1688)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HG2	4	2.5
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:139:PHE:HE1	12	2.5
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:139:PHE:HE1	12	2.5
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:139:PHE:HE1	12	2.5
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:139:PHE:HE1	11	2.49
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:139:PHE:HE1	11	2.49
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:139:PHE:HE1	11	2.49
(1,1688)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HG2	16	2.48
(1,1569)	1:A:82:ARG:HD2	1:A:100:ARG:HB2	17	2.47
(1,818)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:137:GLY:HA2	12	2.46
(1,1692)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HG2	20	2.46
(1,1119)	1:A:46:ARG:HD2	1:A:139:PHE:HE1	12	2.46
(1,1686)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HD2	14	2.45
(1,1426)	1:A:70:ALA:H	1:A:89:TYR:HD1	17	2.44
(1,1691)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HE2	19	2.42
(1,1688)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HG2	2	2.42
(1,1114)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HE1	4	2.42
(1,750)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HE1	10	2.41
(1,1685)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:H	11	2.41
(1,1688)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HG2	11	2.4
(1,804)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:137:GLY:HA3	14	2.39
(1,1687)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HE2	1	2.39
(1,1685)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:H	2	2.39
(1,1687)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HE2	16	2.38
(1,1119)	1:A:46:ARG:HD2	1:A:139:PHE:HE1	15	2.37
(1,1114)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HE1	6	2.37
(1,799)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:H	8	2.35
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD11	3	2.35
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD12	3	2.35
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD13	3	2.35
(1,749)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HD1	5	2.35
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	10	2.34
(1,799)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:H	5	2.34
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD11	5	2.34
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD12	5	2.34
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD13	5	2.34
(1,1691)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HE2	18	2.32



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1690)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:90:GLU:HB2	18	2.32
(1,749)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HD1	17	2.31
(1,1688)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HG2	19	2.31
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB1	1:A:89:TYR:HD1	10	2.31
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB2	1:A:89:TYR:HD1	10	2.31
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB3	1:A:89:TYR:HD1	10	2.31
(1,1684)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:90:GLU:HG2	1	2.3
(1,799)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:H	1	2.29
(1,799)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:H	4	2.29
(1,799)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:H	17	2.28
(1,1691)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HE2	1	2.28
(1,1688)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HG2	13	2.28
(1,771)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:104:GLU:HG2	8	2.27
(1,1685)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:H	15	2.27
(1,1320)	1:A:59:ARG:HG2	1:A:62:GLY:HA2	17	2.27
(1,747)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HB2	10	2.26
(1,804)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:137:GLY:HA3	7	2.24
(1,796)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HB	10	2.23
(1,1692)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HG2	8	2.23
(1,1687)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HE2	19	2.23
(1,1692)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HG2	1	2.21
(1,1320)	1:A:59:ARG:HG2	1:A:62:GLY:HA2	3	2.21
(1,811)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:H	3	2.2
(1,1691)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HE2	14	2.2
(1,1114)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HE1	5	2.2
(1,800)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HA	19	2.19
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG21	1	2.19
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG22	1	2.19
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG23	1	2.19
(1,1685)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:H	13	2.19
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	15	2.19
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	15	2.19
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	15	2.19
(1,1114)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HE1	12	2.19
(1,804)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:137:GLY:HA3	2	2.18
(1,749)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HD1	8	2.18
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA2	5	2.18
(1,1692)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HG2	15	2.16
(1,804)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:137:GLY:HA3	6	2.15
(1,1685)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:H	9	2.15
(1,1320)	1:A:59:ARG:HG2	1:A:62:GLY:HA2	8	2.15
(1,804)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:137:GLY:HA3	20	2.14



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1119)	1:A:46:ARG:HD2	1:A:139:PHE:HE1	3	2.13
(1,1114)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HE1	9	2.13
(1,1687)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HE2	18	2.12
(1,1426)	1:A:70:ALA:H	1:A:89:TYR:HD1	3	2.1
(1,1692)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HG2	11	2.09
(1,1320)	1:A:59:ARG:HG2	1:A:62:GLY:HA2	4	2.09
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	9	2.09
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	9	2.09
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	9	2.09
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG21	11	2.08
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG22	11	2.08
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG23	11	2.08
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	17	2.08
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	17	2.08
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	17	2.08
(1,1202)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:129:TRP:HH2	3	2.06
(1,1114)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HE1	19	2.06
(1,771)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:104:GLU:HG2	19	2.05
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:105:GLY:H	17	2.05
(1,1687)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HE2	9	2.05
(1,1680)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:HD2	20	2.05
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA2	3	2.05
(1,818)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:137:GLY:HA2	14	2.04
(1,799)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:H	3	2.04
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG21	13	2.03
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG22	13	2.03
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG23	13	2.03
(1,749)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HD1	4	2.02
(1,1569)	1:A:82:ARG:HD2	1:A:100:ARG:HB2	6	2.02
(1,1114)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HE1	1	2.02
(1,1202)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:129:TRP:HH2	6	2.01
(1,1121)	1:A:46:ARG:HG2	1:A:139:PHE:HE1	20	2.01
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG21	1	2.0
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG22	1	2.0
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG23	1	2.0
(1,1690)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:90:GLU:HB2	4	2.0
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD11	19	2.0
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD12	19	2.0
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD13	19	2.0
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:139:PHE:HE1	9	2.0
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:139:PHE:HE1	9	2.0
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:139:PHE:HE1	9	2.0



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1680)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:HD2	17	1.99
(1,1320)	1:A:59:ARG:HG2	1:A:62:GLY:HA2	18	1.99
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	7	1.98
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	7	1.98
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	7	1.98
(1,1153)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HG2	15	1.98
(1,749)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HD1	10	1.97
(1,1685)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:H	19	1.97
(1,1680)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:HD2	4	1.97
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	2	1.97
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	2	1.97
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	2	1.97
(1,818)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:137:GLY:HA2	20	1.96
(1,796)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HB	1	1.96
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:105:GLY:H	14	1.96
(1,1690)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:90:GLU:HB2	5	1.95
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	6	1.95
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	6	1.95
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	6	1.95
(1,1684)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:90:GLU:HG2	8	1.94
(1,771)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:104:GLU:HG2	11	1.93
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:105:GLY:H	16	1.93
(1,1119)	1:A:46:ARG:HD2	1:A:139:PHE:HE1	16	1.93
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:139:PHE:HE1	6	1.93
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:139:PHE:HE1	6	1.93
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:139:PHE:HE1	6	1.93
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:105:GLY:H	18	1.92
(1,1691)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HE2	2	1.92
(1,1688)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HG2	18	1.92
(1,1680)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:HD2	6	1.92
(1,798)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:109:LEU:HA	19	1.91
(1,1687)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HE2	14	1.91
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA2	15	1.91
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE1	6	1.91
(1,1691)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HE2	13	1.9
(1,1114)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HE1	15	1.9
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD21	4	1.89
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD22	4	1.89
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD23	4	1.89
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	19	1.89
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	3	1.89
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	3	1.89



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	3	1.89
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	8	1.89
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	8	1.89
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	8	1.89
(1,804)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:137:GLY:HA3	12	1.88
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:105:GLY:H	3	1.88
(1,1426)	1:A:70:ALA:H	1:A:89:TYR:HD1	7	1.88
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA2	19	1.88
(1,765)	1:A:29:ARG:HA	1:A:30:TYR:HD1	9	1.87
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:105:GLY:H	11	1.87
(1,796)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HB	11	1.86
(1,765)	1:A:29:ARG:HA	1:A:30:TYR:HD1	17	1.86
(1,1121)	1:A:46:ARG:HG2	1:A:139:PHE:HE1	1	1.86
(1,1114)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HE1	7	1.86
(1,1687)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HE2	2	1.85
(1,1685)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:H	1	1.85
(1,1692)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HG2	19	1.84
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD21	9	1.84
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD22	9	1.84
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD23	9	1.84
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG21	8	1.83
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG22	8	1.83
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG23	8	1.83
(1,1692)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HG2	2	1.83
(1,1692)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HG2	4	1.83
(1,1688)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HG2	5	1.83
(1,1649)	1:A:87:TRP:HE1	1:A:89:TYR:HE1	10	1.83
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	16	1.83
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	16	1.83
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	16	1.83
(1,1691)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HE2	5	1.82
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD11	8	1.82
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD12	8	1.82
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD13	8	1.82
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD11	8	1.82
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD12	8	1.82
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD13	8	1.82
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD11	8	1.82
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD12	8	1.82
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD13	8	1.82
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:105:GLY:H	12	1.81
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	12	1.81



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	12	1.81
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	12	1.81
(1,813)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HB2	8	1.8
(1,1692)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HG2	16	1.8
(1,1684)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:90:GLU:HG2	15	1.8
(1,1072)	1:A:43:ASP:HB2	1:A:46:ARG:HG2	12	1.8
(1,802)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HB2	4	1.79
(1,2547)	1:A:166:ILE:HB	1:A:169:GLU:HG2	16	1.79
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:105:GLY:H	10	1.79
(1,1692)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HG2	13	1.79
(1,1649)	1:A:87:TRP:HE1	1:A:89:TYR:HE1	3	1.79
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD21	11	1.78
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD22	11	1.78
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD23	11	1.78
(1,813)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HB2	4	1.78
(1,1685)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:H	4	1.78
(1,1685)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:H	16	1.78
(1,1680)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:HD2	7	1.78
(1,2547)	1:A:166:ILE:HB	1:A:169:GLU:HG2	18	1.77
(1,1687)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HE2	5	1.77
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	14	1.77
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	14	1.77
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	14	1.77
(1,1121)	1:A:46:ARG:HG2	1:A:139:PHE:HE1	19	1.77
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD11	16	1.76
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD12	16	1.76
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD13	16	1.76
(1,771)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:104:GLU:HG2	10	1.76
(1,1836)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:HB2	6	1.76
(1,1679)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:HB2	9	1.76
(1,1569)	1:A:82:ARG:HD2	1:A:100:ARG:HB2	19	1.76
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	19	1.76
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	19	1.76
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	19	1.76
(1,1114)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HE1	13	1.76
(1,813)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HB2	1	1.74
(1,802)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HB2	11	1.74
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG21	17	1.74
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG22	17	1.74
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG23	17	1.74
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA2	11	1.74
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD21	13	1.73



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD22	13	1.73
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD23	13	1.73
(1,813)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HB2	13	1.73
(1,802)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HB2	13	1.73
(1,765)	1:A:29:ARG:HA	1:A:30:TYR:HD1	8	1.73
(1,750)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HE1	9	1.72
(1,384)	1:A:14:ARG:H	1:A:20:GLU:HB2	12	1.72
(1,1320)	1:A:59:ARG:HG2	1:A:62:GLY:HA2	7	1.72
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG21	19	1.71
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG22	19	1.71
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG23	19	1.71
(1,2367)	1:A:143:ASP:H	1:A:144:LEU:HB2	5	1.71
(1,1320)	1:A:59:ARG:HG2	1:A:62:GLY:HA2	2	1.71
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD21	1	1.7
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD22	1	1.7
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD23	1	1.7
(1,2547)	1:A:166:ILE:HB	1:A:169:GLU:HG2	6	1.7
(1,1687)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HE2	13	1.7
(1,818)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:137:GLY:HA2	2	1.69
(1,771)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:104:GLU:HG2	15	1.69
(1,765)	1:A:29:ARG:HA	1:A:30:TYR:HD1	16	1.69
(1,1203)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:129:TRP:HZ3	6	1.69
(1,813)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HB2	11	1.67
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:169:GLU:HG2	18	1.67
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:169:GLU:HG2	18	1.67
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:169:GLU:HG2	18	1.67
(1,1649)	1:A:87:TRP:HE1	1:A:89:TYR:HE1	7	1.67
(1,1121)	1:A:46:ARG:HG2	1:A:139:PHE:HE1	5	1.67
(1,1114)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HE1	10	1.67
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD11	2	1.66
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD12	2	1.66
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD13	2	1.66
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD11	2	1.66
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD12	2	1.66
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD13	2	1.66
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD11	2	1.66
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD12	2	1.66
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD13	2	1.66
(1,796)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HB	8	1.65
(1,771)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:104:GLU:HG2	16	1.65
(1,2230)	1:A:131:MET:HE1	1:A:167:SER:HB2	20	1.65
(1,2230)	1:A:131:MET:HE2	1:A:167:SER:HB2	20	1.65



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2230)	1:A:131:MET:HE3	1:A:167:SER:HB2	20	1.65
(1,1121)	1:A:46:ARG:HG2	1:A:139:PHE:HE1	10	1.65
(1,818)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:137:GLY:HA2	7	1.64
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD21	19	1.64
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD22	19	1.64
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD23	19	1.64
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:105:GLY:H	19	1.64
(1,813)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HB2	17	1.63
(1,1708)	1:A:92:LYS:HA	1:A:92:LYS:HD2	9	1.63
(1,1449)	1:A:71:SER:H	1:A:89:TYR:HD1	17	1.63
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD11	5	1.63
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD12	5	1.63
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD13	5	1.63
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD11	5	1.63
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD12	5	1.63
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD13	5	1.63
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD11	5	1.63
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD12	5	1.63
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD13	5	1.63
(1,928)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:38:TRP:HD1	17	1.62
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD21	17	1.62
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD22	17	1.62
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD23	17	1.62
(1,802)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HB2	8	1.62
(1,750)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HE1	1	1.62
(1,1836)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:HB2	10	1.62
(1,1685)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:H	5	1.62
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	14	1.62
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	14	1.62
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	14	1.62
(1,1114)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HE1	14	1.62
(1,796)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HB	13	1.61
(1,1680)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:HD2	1	1.61
(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD11	2	1.6
(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD12	2	1.6
(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD13	2	1.6
(1,928)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:38:TRP:HD1	2	1.59
(1,818)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:137:GLY:HA2	18	1.59
(1,2526)	1:A:165:ARG:HA	1:A:168:GLN:HG2	3	1.59
(1,2257)	1:A:133:LEU:HB2	1:A:136:LEU:HB2	14	1.59
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA2	4	1.59
(1,765)	1:A:29:ARG:HA	1:A:30:TYR:HD1	5	1.58



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,333)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:181:GLY:HA2	5	1.58
(1,333)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:181:GLY:HA2	5	1.58
(1,333)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:181:GLY:HA2	5	1.58
(1,1121)	1:A:46:ARG:HG2	1:A:139:PHE:HE1	8	1.58
(1,1121)	1:A:46:ARG:HG2	1:A:139:PHE:HE1	13	1.58
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA2	17	1.57
(1,1119)	1:A:46:ARG:HD2	1:A:139:PHE:HE1	14	1.57
(1,802)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HB2	1	1.56
(1,1686)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HD2	11	1.56
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD21	20	1.56
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD22	20	1.56
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD23	20	1.56
(1,1320)	1:A:59:ARG:HG2	1:A:62:GLY:HA2	9	1.56
(1,1119)	1:A:46:ARG:HD2	1:A:139:PHE:HE1	17	1.56
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:105:GLY:H	13	1.55
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB1	1:A:89:TYR:HD1	17	1.55
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB2	1:A:89:TYR:HD1	17	1.55
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB3	1:A:89:TYR:HD1	17	1.55
(1,1118)	1:A:46:ARG:HD2	1:A:139:PHE:HZ	11	1.55
(1,928)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:38:TRP:HD1	19	1.54
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD21	3	1.54
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD22	3	1.54
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD23	3	1.54
(1,812)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HG	10	1.54
(1,807)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HG21	15	1.54
(1,807)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HG22	15	1.54
(1,807)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HG23	15	1.54
(1,1714)	1:A:92:LYS:HD2	1:A:93:PRO:HD2	9	1.54
(1,1649)	1:A:87:TRP:HE1	1:A:89:TYR:HE1	17	1.54
(1,1024)	1:A:39:SER:HB2	1:A:46:ARG:HD2	19	1.54
(1,771)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:104:GLU:HG2	20	1.53
(1,765)	1:A:29:ARG:HA	1:A:30:TYR:HD1	13	1.53
(1,384)	1:A:14:ARG:H	1:A:20:GLU:HB2	18	1.53
(1,1420)	1:A:69:ASN:HA	1:A:89:TYR:HE1	10	1.53
(1,802)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HB2	17	1.52
(1,1690)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:90:GLU:HB2	9	1.52
(1,1680)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:HD2	2	1.52
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA2	1	1.52
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG21	10	1.51
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG22	10	1.51
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG23	10	1.51
(1,388)	1:A:14:ARG:H	1:A:22:ARG:HG2	1	1.51



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2477)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HG2	19	1.51
(1,1684)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:90:GLU:HG2	2	1.51
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD21	8	1.5
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD22	8	1.5
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD23	8	1.5
(1,802)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HB2	5	1.5
(1,1649)	1:A:87:TRP:HE1	1:A:89:TYR:HE1	6	1.5
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	9	1.5
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	9	1.5
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	9	1.5
(1,2364)	1:A:142:GLY:H	1:A:144:LEU:HB2	5	1.49
(1,1714)	1:A:92:LYS:HD2	1:A:93:PRO:HD2	8	1.49
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD21	5	1.48
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD22	5	1.48
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD23	5	1.48
(1,807)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HG21	12	1.48
(1,807)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HG22	12	1.48
(1,807)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HG23	12	1.48
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD11	9	1.48
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD12	9	1.48
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD13	9	1.48
(1,1690)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:90:GLU:HB2	1	1.48
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA2	20	1.48
(1,1150)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:H	15	1.48
(1,820)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:37:VAL:HG11	1	1.47
(1,820)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:37:VAL:HG12	1	1.47
(1,820)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:37:VAL:HG13	1	1.47
(1,771)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:104:GLU:HG2	14	1.47
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG21	8	1.47
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG22	8	1.47
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG23	8	1.47
(1,2505)	1:A:163:MET:HE1	1:A:167:SER:HB2	1	1.47
(1,2505)	1:A:163:MET:HE2	1:A:167:SER:HB2	1	1.47
(1,2505)	1:A:163:MET:HE3	1:A:167:SER:HB2	1	1.47
(1,1285)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HA	18	1.47
(1,928)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:38:TRP:HD1	1	1.46
(1,2547)	1:A:166:ILE:HB	1:A:169:GLU:HG2	7	1.46
(1,928)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:38:TRP:HD1	4	1.45
(1,1381)	1:A:65:ALA:HB1	1:A:71:SER:HB2	1	1.45
(1,1381)	1:A:65:ALA:HB2	1:A:71:SER:HB2	1	1.45
(1,1381)	1:A:65:ALA:HB3	1:A:71:SER:HB2	1	1.45
(1,818)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:137:GLY:HA2	15	1.44



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,802)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HB2	3	1.44
(1,362)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:23:SER:HG	2	1.44
(1,255)	1:A:9:ARG:HE	1:A:130:GLU:HG2	18	1.44
(1,2477)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HG2	10	1.44
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB1	15	1.44
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB2	15	1.44
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB3	15	1.44
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	13	1.44
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	13	1.44
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	13	1.44
(1,1114)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HE1	8	1.44
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD11	2	1.44
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD12	2	1.44
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD13	2	1.44
(1,2656)	1:A:176:ALA:H	1:A:179:HIS:HB2	5	1.43
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:169:GLU:HG2	16	1.43
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:169:GLU:HG2	16	1.43
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:169:GLU:HG2	16	1.43
(1,2530)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:168:GLN:HG2	3	1.43
(1,1569)	1:A:82:ARG:HD2	1:A:100:ARG:HB2	18	1.43
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	20	1.43
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	20	1.43
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	20	1.43
(1,1072)	1:A:43:ASP:HB2	1:A:46:ARG:HG2	9	1.43
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD21	9	1.42
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD22	9	1.42
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD23	9	1.42
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD21	10	1.42
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD22	10	1.42
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD23	10	1.42
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG21	11	1.42
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG22	11	1.42
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG23	11	1.42
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG21	19	1.42
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG22	19	1.42
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG23	19	1.42
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:169:GLU:HG2	6	1.42
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:169:GLU:HG2	6	1.42
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:169:GLU:HG2	6	1.42
(1,811)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:H	19	1.41
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG21	15	1.41
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG22	15	1.41



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG23	15	1.41
(1,2526)	1:A:165:ARG:HA	1:A:168:GLN:HG2	18	1.41
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB1	7	1.41
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB2	7	1.41
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB3	7	1.41
(1,1571)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:99:LEU:H	1	1.41
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	4	1.41
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	4	1.41
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	4	1.41
(1,928)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:38:TRP:HD1	20	1.4
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG21	13	1.4
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG22	13	1.4
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG23	13	1.4
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB2	8	1.4
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB2	8	1.4
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB2	8	1.4
(1,1684)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:90:GLU:HG2	16	1.4
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB1	1:A:89:TYR:HD1	3	1.4
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB2	1:A:89:TYR:HD1	3	1.4
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB3	1:A:89:TYR:HD1	3	1.4
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD11	9	1.39
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD12	9	1.39
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD13	9	1.39
(1,813)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HB2	5	1.39
(1,802)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HB2	9	1.39
(1,765)	1:A:29:ARG:HA	1:A:30:TYR:HD1	4	1.39
(1,802)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HB2	16	1.38
(1,388)	1:A:14:ARG:H	1:A:22:ARG:HG2	16	1.38
(1,1860)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:107:GLY:H	8	1.38
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB2	2	1.38
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB2	2	1.38
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB2	2	1.38
(1,1571)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:99:LEU:H	17	1.38
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD11	16	1.37
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD12	16	1.37
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD13	16	1.37
(1,384)	1:A:14:ARG:H	1:A:20:GLU:HB2	13	1.37
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB2	13	1.37
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB2	13	1.37
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB2	13	1.37
(1,1692)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HG2	18	1.37
(1,1680)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:HD2	16	1.37



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

(1,1571)       1:A:82:ARG:HG2       1:A:99:LEU:H       6         (1,1571)       1:A:82:ARG:HG2       1:A:99:LEU:H       9         (1,1285)       1:A:56:GLY:HA2       1:A:64:PHE:HA       16         (1,1273)       1:A:55:LYS:HD2       1:A:56:GLY:H       19         (1,805)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:137:GLY:HA2       6         (1,1787)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:112:LEU:H       9         (1,1787)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:112:LEU:H       9         (1,1787)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:112:LEU:H       9	1.37 1.37 1.37 1.37 1.36 1.36 1.36 1.36
(1,1285)       1:A:56:GLY:HA2       1:A:64:PHE:HA       16         (1,1273)       1:A:55:LYS:HD2       1:A:56:GLY:H       19         (1,805)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:137:GLY:HA2       6         (1,1787)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:112:LEU:H       9         (1,1787)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:112:LEU:H       9         (1,1787)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:112:LEU:H       9	1.37 1.37 1.36 1.36 1.36 1.36
(1,1273)       1:A:55:LYS:HD2       1:A:56:GLY:H       19         (1,805)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:137:GLY:HA2       6         (1,1787)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:112:LEU:H       9         (1,1787)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:112:LEU:H       9         (1,1787)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:112:LEU:H       9	1.37 1.36 1.36 1.36 1.36
(1,805)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:137:GLY:HA2       6         (1,1787)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:112:LEU:H       9         (1,1787)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:112:LEU:H       9         (1,1787)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:112:LEU:H       9	1.36 1.36 1.36 1.36
(1,1787)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:112:LEU:H       9         (1,1787)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:112:LEU:H       9         (1,1787)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:112:LEU:H       9	1.36 1.36 1.36
(1,1787)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:112:LEU:H       9         (1,1787)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:112:LEU:H       9	1.36 1.36
(1,1787) 1:A:99:LEU:HD13 1:A:112:LEU:H 9	1.36
· / /	
(1 1001) 1 1 00 MVD HD0 11 1 00 HVC Y CO	1.36
(1,1681) 1:A:89:TYR:HB2 1:A:92:LYS:HG2 9	2.00
(1,1571) 1:A:82:ARG:HG2 1:A:99:LEU:H 14	1.36
(1,1066) 1:A:42:THR:HG21 1:A:99:LEU:HD11 19	1.36
(1,1066) 1:A:42:THR:HG21 1:A:99:LEU:HD12 19	1.36
(1,1066) 1:A:42:THR:HG21 1:A:99:LEU:HD13 19	1.36
(1,1066) 1:A:42:THR:HG22 1:A:99:LEU:HD11 19	1.36
(1,1066) 1:A:42:THR:HG22 1:A:99:LEU:HD12 19	1.36
(1,1066) 1:A:42:THR:HG22 1:A:99:LEU:HD13 19	1.36
(1,1066) 1:A:42:THR:HG23 1:A:99:LEU:HD11 19	1.36
(1,1066) 1:A:42:THR:HG23 1:A:99:LEU:HD12 19	1.36
(1,1066) 1:A:42:THR:HG23 1:A:99:LEU:HD13 19	1.36
(1,804) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:137:GLY:HA3 18	1.35
(1,1836) 1:A:102:SER:HB2 1:A:109:LEU:HB2 15	1.35
(1,1781) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:100:ARG:H 13	1.35
(1,1781) 1:A:99:LEU:HD12 1:A:100:ARG:H 13	1.35
(1,1781) 1:A:99:LEU:HD13 1:A:100:ARG:H 13	1.35
(1,1684) 1:A:89:TYR:HD1 1:A:90:GLU:HG2 17	1.35
(1,1208) 1:A:51:PHE:HE1 1:A:66:LEU:HD21 7	1.35
(1,1208) 1:A:51:PHE:HE1 1:A:66:LEU:HD22 7	1.35
(1,1208) 1:A:51:PHE:HE1 1:A:66:LEU:HD23 7	1.35
(1,1836) 1:A:102:SER:HB2 1:A:109:LEU:HB2 8	1.34
(1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 5	1.34
(1,1818) 1:A:101:LEU:HD22 1:A:109:LEU:HB2 5	1.34
(1,1818) 1:A:101:LEU:HD23 1:A:109:LEU:HB2 5	1.34
(1,1680) 1:A:89:TYR:HB2 1:A:92:LYS:HD2 18	1.34
(1,1649) 1:A:87:TRP:HE1 1:A:89:TYR:HE1 12	1.34
(1,928) 1:A:35:ASP:HB2 1:A:38:TRP:HD1 10	1.33
(1,813) 1:A:30:TYR:HE1 1:A:110:LEU:HB2 9	1.33
(1,401) 1:A:14:ARG:HE 1:A:96:GLU:HG2 13	1.33
(1,2578) 1:A:169:GLU:HA 1:A:172:GLU:HG2 15	1.33
(1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 3	1.33
(1,1818) 1:A:101:LEU:HD22 1:A:109:LEU:HB2 3	1.33
(1,1818) 1:A:101:LEU:HD23 1:A:109:LEU:HB2 3	1.33
(1,1787) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:112:LEU:H 1	1.33



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:112:LEU:H	1	1.33
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:112:LEU:H	1	1.33
(1,1781)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:100:ARG:H	14	1.33
(1,1781)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:100:ARG:H	14	1.33
(1,1781)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:100:ARG:H	14	1.33
(1,1679)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:HB2	8	1.33
(1,1449)	1:A:71:SER:H	1:A:89:TYR:HD1	10	1.33
(1,1113)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HZ	11	1.33
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD11	5	1.33
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD12	5	1.33
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD13	5	1.33
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:139:PHE:HE1	18	1.33
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:139:PHE:HE1	18	1.33
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:139:PHE:HE1	18	1.33
(1,796)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HB	19	1.32
(1,771)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:104:GLU:HG2	3	1.32
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:112:LEU:H	14	1.32
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:112:LEU:H	14	1.32
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:112:LEU:H	14	1.32
(1,980)	1:A:38:TRP:H	1:A:39:SER:HB2	12	1.31
(1,980)	1:A:38:TRP:H	1:A:39:SER:HB2	14	1.31
(1,559)	1:A:24:ILE:H	1:A:113:GLU:HG2	2	1.31
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB2	4	1.31
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB2	4	1.31
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB2	4	1.31
(1,1420)	1:A:69:ASN:HA	1:A:89:TYR:HE1	17	1.31
(1,1114)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HE1	3	1.31
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD11	2	1.31
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD12	2	1.31
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD13	2	1.31
(1,928)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:38:TRP:HD1	3	1.3
(1,773)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:30:TYR:H	20	1.3
(1,559)	1:A:24:ILE:H	1:A:113:GLU:HG2	8	1.3
(1,2526)	1:A:165:ARG:HA	1:A:168:GLN:HG2	1	1.3
(1,1685)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:H	20	1.3
(1,1680)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:HD2	14	1.3
(1,1571)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:99:LEU:H	20	1.3
(1,1104)	1:A:46:ARG:H	1:A:47:ILE:HG12	15	1.3
(1,816)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:133:LEU:HD11	11	1.29
(1,816)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:133:LEU:HD12	11	1.29
(1,816)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:133:LEU:HD13	11	1.29
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG21	9	1.29



Continued from previous page...

(1,797) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:108:THR:HG22 9 1.29 (1,797) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:108:THR:HG23 9 1.29 (1,797) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:108:THR:HG21 16 1.29 (1,797) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:108:THR:HG22 16 1.29 (1,797) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:108:THR:HG23 16 1.29 (1,797) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:108:THR:HG23 16 1.29 (1,362) 1:A:12:GDY:HA2 1:A:23:SER:HG 12 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 10 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD22 1:A:109:LEU:HB2 10 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD22 1:A:109:LEU:HB2 10 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD23 1:A:109:LEU:HB2 10 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD23 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD22 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD22 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD23 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HBB1 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HBB1 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HBB1 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:10:AC:HBB2 1:A:99:TYR:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:10:AC:HBB2 1:A:99:LEU:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:10:AC:HBB2 1:A:99:LEU:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:10:AC:HBB2 1:A:99:LEU:HD1 7 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD1 7 1.28 (1,1641) 1:A:40:ALA:HB1 1:A:13:99:LEU:HD1 7 1.28 (1,1641) 1:A:40:ALA:HB1 1:A:13:99:LEU:HD1 7 1.28 (1,1641) 1:A:40:ALA:HB1 1:A:13:99:LEU:HD1 1 7 1.28 (1,1641) 1:A:40:ALA:HB1 1:A:13:99:LEU:HD1 1 7 1.28 (1,1641) 1:A:40:ALA:HB1 1:A:10:LEU:HD2 1 1.27 (1,1818) 1:A:10:LEU:HD2 1 1.27 (1,1818) 1:A:10:LEU:HD2 1 1.27 (1,1818) 1:A:10:LEU:HD2 1 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD1 1	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,797) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:108:THR:HG21 16 1.29 (1,797) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:108:THR:HG22 16 1.29 (1,362) 1:A:12:GLY:HA2 1:A:23:SER:HG 12 1.29 (1,362) 1:A:12:GLY:HA2 1:A:23:SER:HG 12 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 10 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD22 1:A:109:LEU:HB2 10 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD23 1:A:109:LEU:HB2 10 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD23 1:A:109:LEU:HB2 10 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD23 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD23 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD23 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD23 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:70:ALA:HB3 1:A:89:TVR:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:40:ALA:HB3 1:A:39:LEU:HD1 7 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD11 7 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD11 7 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD11 7 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:39:LEU:HD11 7 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:39:LEU:HD11 7 1.28 (1,1641) 1:A:40:ALA:HB3 1:A:139:PHE:HE1 15 1.28 (1,1641) 1:A:15:GLU:HB2 1:A:15:ALA:HB3 20 1.27 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD22 1:A:15:ALA:HB3 20 1.27 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD23 9 1.27 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD2	(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG22	9	1.29
(1,797) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:108:THR:HG22 16 1.29 (1,797) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:108:THR:HG23 16 1.29 (1,362) 1:A:12:GLY:HA2 1:A:23:SER:HG 12 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 10 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD22 1:A:109:LEU:HB2 10 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD23 1:A:109:LEU:HB2 10 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 10 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD22 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD23 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD23 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1400) 1:A:70:ALA:HB1 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HB3 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,188) 1:A:4:ARG:H 1:A:20:GLU:HB2 13 1.29 (1,384) 1:A:14:ARG:H 1:A:20:GLU:HB2 15 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD12 7 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD11 7 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD12 7 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD13 7 1.28 (1,1414) 1:A:40:ALA:HB3 1:A:39:PHE:HE1 15 1.28 (1,1041) 1:A:40:ALA:HB3 1:A:39:PHE:HE1 15 1.28 (1,1041) 1:A:40:ALA:HB3 1:A:39:PHE:HE1 15 1.28 (1,1041) 1:A:40:ALA:HB3 1:A:139:PHE:HE1 15 1.28 (1,1418) 1:A:151:GLU:HB2 1:A:139:PHE:HE1 15 1.28 (1,1418) 1:A:151:GLU:HB2 1:A:139:PHE:HE1 15 1.28 (1,1818) 1:A:151:GLU:HB2 1:A:153:ALA:HB3 20 1.27 (1,2419) 1:A:151:GLU:HB2 1:A:153:ALA:HB3 20 1.27 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:100:LEU:HD21 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:110:LEU:HD22 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:110:LEU:HD23 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:110:LEU:HD23 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:110:LEU:HD23 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD12 1:A:110:LEU:HD23 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD12 1:A:110:LEU:HD23 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD11	(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG23	9	1.29
(1,797)	(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG21	16	1.29
(1,362) 1:A:12:GLY:HA2 1:A:23:SER:HG 12 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 10 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD22 1:A:109:LEU:HB2 10 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD23 1:A:109:LEU:HB2 10 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD22 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD23 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD23 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:70:ALA:HB1 1:A:96:GLU:HG2 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HB1 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HB3 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HB2 1:A:99:LEU:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HB3 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HB3 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HB2 1:A:99:LEU:HD1 7 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD11 7 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD11 7 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD12 7 1.28 (1,1530) 1:A:78:GLU:H 1:A:79:PRO:HB2 13 1.28 (1,1530) 1:A:78:GLU:H 1:A:79:PRO:HB2 13 1.28 (1,1041) 1:A:40:ALA:HB2 1:A:139:PHE:HE1 15 1.28 (1,750) 1:A:78:GLU:HB2 1:A:153:ALA:HB3 20 1.27 (1,2419) 1:A:151:GLU:HB2 1:A:153:ALA:HB3 20 1.27 (1,2419) 1:A:151:GLU:HB2 1:A:153:ALA:HB3 20 1.27 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 1 1.27 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 1 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:110:LEU:HD22 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:110:LEU:HD23 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:110:LEU:HD23 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:110:LEU:HD23 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD12 1:A:110:LEU:HD23 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:110:LEU:HD22 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:110:LEU:HD23	(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG22	16	1.29
(1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 10 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD22 1:A:109:LEU:HB2 10 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD23 1:A:109:LEU:HB2 10 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD22 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD22 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD23 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD23 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1606) 1:A:85:ILE:H 1:A:96:GLU:HG2 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HB1 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HB2 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HB3 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1441) 1:A:67:GLN:HG2 1:A:68:GLY:HA2 13 1.29 (1,384) 1:A:14:ARG:H 1:A:20:GLU:HB2 5 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD11 7 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD11 7 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD12 7 1.28 (1,1530) 1:A:78:GLU:H 1:A:79:PRO:HB2 13 1.28 (1,1414) 1:A:67:GLN:HG2 1:A:68:GLY:HA2 13 1.28 (1,1041) 1:A:40:ALA:HB1 1:A:139:PHE:HE1 15 1.28 (1,1041) 1:A:40:ALA:HB3 1:A:139:PHE:HE1 15 1.28 (1,1041) 1:A:40:ALA:HB3 1:A:139:PHE:HE1 15 1.28 (1,159) 1:A:28:GLN:HB2 1:A:30:TYR:HE1 15 1.28 (1,1504) 1:A:151:GLU:HB2 1:A:30:TYR:HE1 15 1.28 (1,151) 1:A:151:GLU:HB2 1:A:153:ALA:HB3 20 1.27 (1,2419) 1:A:151:GLU:HB2 1:A:153:ALA:HB3 20 1.27 (1,2419) 1:A:151:GLU:HB2 1:A:153:ALA:HB3 20 1.27 (1,2419) 1:A:151:GLU:HB2 1:A:153:ALA:HB3 20 1.27 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HD22 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:110:LEU:HD22 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:110:LEU:HD23 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:110:LEU:HD23 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD12 1:A:110:LEU:HD23 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD13 1:A:110:LEU:HD23 9 1.27	(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG23	16	1.29
(1,1818)         1:A:101:LEU:HD22         1:A:109:LEU:HB2         10         1.29           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD23         1:A:109:LEU:HB2         10         1.29           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD21         1:A:109:LEU:HB2         19         1.29           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD22         1:A:109:LEU:HB2         19         1.29           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD23         1:A:109:LEU:HB2         19         1.29           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD23         1:A:109:LEU:HB2         19         1.29           (1,1400)         1:A:85:LLE:H         1:A:109:LEU:HB2         19         1.29           (1,1440)         1:A:70:ALA:HB1         1:A:89:TYR:HD1         7         1.29           (1,1440)         1:A:70:ALA:HB2         1:A:89:TYR:HD1         7         1.29           (1,1440)         1:A:70:ALA:HB3         1:A:89:TYR:HD1         7         1.29           (1,1440)         1:A:70:ALA:HB3         1:A:89:TYR:HD1         7         1.29           (1,1441)         1:A:67:GLN:HG2         1:A:68:GLY:HA2         13         1.29           (1,1582)         1:A:83:LEU:HB2         1:A:99:LEU:HD11         7         1.28           (1,1582)         1:A:83:LEU:HB2	(1,362)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:23:SER:HG	12	1.29
(1,1818) 1:A:101:LEU:HD23 1:A:109:LEU:HB2 10 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD22 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD23 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD23 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD23 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:70:ALA:HB1 1:A:96:GLU:HG2 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HB1 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HB2 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HB2 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HB3 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1441) 1:A:67:GLN:HG2 1:A:68:GLY:HA2 13 1.29 (1,384) 1:A:14:ARG:H 1:A:20:GLU:HB2 5 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD11 7 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD11 7 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD12 7 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD13 7 1.28 (1,1414) 1:A:67:GLN:HG2 1:A:68:GLY:HA2 12 1.28 (1,1414) 1:A:67:GLN:HG2 1:A:68:GLY:HA2 12 1.28 (1,1041) 1:A:40:ALA:HB1 1:A:139:PHE:HE1 15 1.28 (1,1041) 1:A:40:ALA:HB2 1:A:139:PHE:HE1 15 1.28 (1,1041) 1:A:40:ALA:HB2 1:A:139:PHE:HE1 15 1.28 (1,1041) 1:A:40:ALA:HB2 1:A:139:PHE:HE1 15 1.28 (1,150) 1:A:28:GLN:HB2 1:A:30:TYR:HE1 13 1.27 (1,2419) 1:A:151:GLU:HB2 1:A:153:ALA:HB3 20 1.27 (1,2419) 1:A:151:GLU:HB2 1:A:153:ALA:HB3 20 1.27 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 1 1.27 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 1 1.27 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 1 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:110:LEU:HD22 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:110:LEU:HD23 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:110:LEU:HD23 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:110:LEU:HD23 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD13 1:A:110:LEU:HD23 9 1.27	(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB2	10	1.29
(1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD22 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD23 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1606) 1:A:85:ILE:H 1:A:96:GLU:HG2 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HB1 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HB2 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HB3 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HB3 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HB3 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1441) 1:A:67:GLN:HG2 1:A:68:GLY:HA2 13 1.29 (1,384) 1:A:14:ARG:H 1:A:20:GLU:HB2 5 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD11 7 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD12 7 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD12 7 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD13 7 1.28 (1,1530) 1:A:78:GLU:H 1:A:79:PRO:HB2 13 1.28 (1,1041) 1:A:40:ALA:HB1 1:A:139:PHE:HE1 15 1.28 (1,1041) 1:A:40:ALA:HB3 1:A:139:PHE:HE1 15 1.28 (1,1041) 1:A:40:ALA:HB3 1:A:139:PHE:HE1 15 1.28 (1,1041) 1:A:40:ALA:HB3 1:A:139:PHE:HE1 15 1.28 (1,1041) 1:A:28:GLN:HB2 1:A:30:TYR:HE1 13 1.27 (1,2419) 1:A:151:GLU:HB2 1:A:153:ALA:HB3 20 1.27 (1,2419) 1:A:151:GLU:HB2 1:A:153:ALA:HB3 20 1.27 (1,2419) 1:A:151:GLU:HB2 1:A:153:ALA:HB3 20 1.27 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 1 1.27 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 1 1.27 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 1 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:110:LEU:HD21 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:110:LEU:HD22 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD12 1:A:110:LEU:HD21 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD12 1:A:110:LEU:HD22 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD12 1:A:110:LEU:HD22 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD12 1:A:110:LEU:HD21 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD12 1:A:110:LEU:HD22 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD13 1:A:110:LEU:HD22 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD13 1:A:110:LEU:HD22 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD13 1:A:110:LEU:HD22 9 1.27	(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB2	10	1.29
(1,1818) 1:A:101:LEU:HD22 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD23 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1606) 1:A:85:ILE:H 1:A:96:GLU:HG2 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HB1 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HB2 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HB3 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:67:GLA:HB3 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1441 1:A:67:GLN:HG2 1:A:68:GLY:HA2 13 1.29 (1,384) 1:A:14:ARG:H 1:A:20:GLU:HB2 5 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD11 7 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD11 7 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD12 7 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD13 7 1.28 (1,1530) 1:A:78:GLU:H 1:A:79:PRO:HB2 13 1.28 (1,1414) 1:A:67:GLN:HG2 1:A:68:GLY:HA2 12 1.28 (1,1041) 1:A:40:ALA:HB1 1:A:139:PHE:HE1 15 1.28 (1,1041) 1:A:40:ALA:HB2 1:A:139:PHE:HE1 15 1.28 (1,1041) 1:A:40:ALA:HB3 1:A:139:PHE:HE1 15 1.28 (1,1504) 1:A:28:GLN:HB2 1:A:30:TYR:HE1 13 1.27 (1,2419) 1:A:151:GLU:HB2 1:A:153:ALA:HB3 20 1.27 (1,2419) 1:A:151:GLU:HB2 1:A:153:ALA:HB3 20 1.27 (1,2419) 1:A:151:GLU:HB2 1:A:153:ALA:HB3 20 1.27 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 1 1.27 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 1 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:110:LEU:HD21 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:110:LEU:HD22 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD12 1:A:110:LEU:HD23 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD12 1:A:110:LEU:HD24 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD13 1:A:110:LEU:HD24 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD13 1:A:110:LEU:HD24 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD12 1:A:110:LEU:HD24 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD12 1:A:110:LEU:HD24 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD14 1:A:110:LEU:HD24 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD12 1:A:110:LEU:HD24 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD14 1:A:110:LEU:HD24 9 1.27	(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB2	10	1.29
(1,1818) 1:A:101:LEU:HD23 1:A:109:LEU:HB2 19 1.29 (1,1606) 1:A:85:ILE:H 1:A:96:GLU:HG2 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HB1 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HB2 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HB3 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HB3 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1441) 1:A:67:GLN:HG2 1:A:68:GLY:HA2 13 1.29 (1,384) 1:A:14:ARG:H 1:A:20:GLU:HB2 5 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD11 7 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD12 7 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD13 7 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD13 7 1.28 (1,1530) 1:A:78:GLU:H 1:A:79:PRO:HB2 13 1.28 (1,1414) 1:A:67:GLN:HG2 1:A:68:GLY:HA2 12 1.28 (1,1041) 1:A:40:ALA:HB1 1:A:139:PHE:HE1 15 1.28 (1,1041) 1:A:40:ALA:HB2 1:A:139:PHE:HE1 15 1.28 (1,1041) 1:A:40:ALA:HB3 1:A:139:PHE:HE1 15 1.28 (1,750) 1:A:28:GLN:HB2 1:A:30:TYR:HE1 13 1.27 (1,2419) 1:A:151:GLU:HB2 1:A:153:ALA:HB1 20 1.27 (1,2419) 1:A:151:GLU:HB2 1:A:153:ALA:HB2 20 1.27 (1,2419) 1:A:151:GLU:HB2 1:A:153:ALA:HB2 20 1.27 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 1 1.27 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 1 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:110:LEU:HD21 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:110:LEU:HD22 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:110:LEU:HD22 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD12 1:A:110:LEU:HD22 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD13 1:A:110:LEU:HD22 9 1.27	(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB2	19	1.29
(1,1606)         1:A:85:ILE:H         1:A:96:GLU:HG2         7         1.29           (1,1440)         1:A:70:ALA:HB1         1:A:89:TYR:HD1         7         1.29           (1,1440)         1:A:70:ALA:HB2         1:A:89:TYR:HD1         7         1.29           (1,1440)         1:A:70:ALA:HB3         1:A:89:TYR:HD1         7         1.29           (1,1444)         1:A:67:GLN:HG2         1:A:68:GLY:HA2         13         1.29           (1,1441)         1:A:67:GLN:HG2         1:A:68:GLY:HA2         13         1.29           (1,384)         1:A:14:ARG:H         1:A:20:GLU:HB2         5         1.28           (1,1582)         1:A:83:LEU:HB2         1:A:99:LEU:HD11         7         1.28           (1,1582)         1:A:83:LEU:HB2         1:A:99:LEU:HD13         7         1.28           (1,1582)         1:A:83:LEU:HB2         1:A:79:PRO:HB2         13         1.28           (1,1582)         1:A:83:LEU:HB2         1:A:79:PRO:HB2         13         1.28           (1,1582)         1:A:67:GLN:HG2         1:A:68:GLY:HA2         12         1.28           (1,1414)         1:A:67:GLN:HG2         1:A:68:GLY:HA2         12         1.28           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB1         1:A:139:PHE:	(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB2	19	1.29
(1,1440) 1:A:70:ALA:HB1 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HB2 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HB3 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1440) 1:A:70:ALA:HB3 1:A:89:TYR:HD1 7 1.29 (1,1414) 1:A:67:GLN:HG2 1:A:68:GLY:HA2 13 1.29 (1,384) 1:A:14:ARG:H 1:A:20:GLU:HB2 5 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD11 7 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD12 7 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD13 7 1.28 (1,1582) 1:A:83:LEU:HB2 1:A:99:LEU:HD13 7 1.28 (1,1580) 1:A:78:GLU:H 1:A:79:PRO:HB2 13 1.28 (1,1414) 1:A:67:GLN:HG2 1:A:68:GLY:HA2 12 1.28 (1,1041) 1:A:40:ALA:HB1 1:A:139:PHE:HB1 15 1.28 (1,1041) 1:A:40:ALA:HB1 1:A:139:PHE:HB1 15 1.28 (1,1041) 1:A:40:ALA:HB2 1:A:39:PHE:HB1 15 1.28 (1,1041) 1:A:28:GLN:HB2 1:A:30:TYR:HB1 13 1.27 (1,2419) 1:A:151:GLU:HB2 1:A:153:ALA:HB1 20 1.27 (1,2419) 1:A:151:GLU:HB2 1:A:153:ALA:HB2 20 1.27 (1,2419) 1:A:151:GLU:HB2 1:A:153:ALA:HB3 20 1.27 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 1 1.27 (1,1818) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:109:LEU:HB2 1 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:110:LEU:HD21 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:110:LEU:HD22 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD12 1:A:110:LEU:HD23 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:110:LEU:HD23 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD12 1:A:110:LEU:HD23 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:110:LEU:HD23 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD12 1:A:110:LEU:HD23 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD13 1:A:110:LEU:HD23 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD13 1:A:110:LEU:HD23 9 1.27 (1,1785) 1:A:99:LEU:HD13 1:A:110:LEU:HD23 9 1.27	(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB2	19	1.29
(1,1440)         1:A:70:ALA:HB2         1:A:89:TYR:HD1         7         1.29           (1,1440)         1:A:70:ALA:HB3         1:A:89:TYR:HD1         7         1.29           (1,1414)         1:A:67:GLN:HG2         1:A:68:GLY:HA2         13         1.29           (1,384)         1:A:14:ARG:H         1:A:20:GLU:HB2         5         1.28           (1,1582)         1:A:83:LEU:HB2         1:A:99:LEU:HD11         7         1.28           (1,1582)         1:A:83:LEU:HB2         1:A:99:LEU:HD12         7         1.28           (1,1582)         1:A:83:LEU:HB2         1:A:99:LEU:HD13         7         1.28           (1,1582)         1:A:83:LEU:HB2         1:A:99:LEU:HD13         7         1.28           (1,1580)         1:A:78:GLU:HB2         1:A:99:LEU:HD13         7         1.28           (1,1580)         1:A:78:GLU:HB2         1:A:68:GLY:HA2         12         1.28           (1,1414)         1:A:67:GLN:HG2         1:A:68:GLY:HA2         12         1.28           (1,1414)         1:A:40:ALA:HB1         1:A:13:39:PHE:HE1         15         1.28           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB3         1:A:13:39:PHE:HE1         15         1.28           (1,750)         1:A:28:GLV:HB2         1:A	(1,1606)	1:A:85:ILE:H	1:A:96:GLU:HG2	7	1.29
(1,1440)         1:A:70:ALA:HB3         1:A:89:TYR:HD1         7         1.29           (1,1414)         1:A:67:GLN:HG2         1:A:68:GLY:HA2         13         1.29           (1,384)         1:A:14:ARG:H         1:A:20:GLU:HB2         5         1.28           (1,1582)         1:A:83:LEU:HB2         1:A:99:LEU:HD11         7         1.28           (1,1582)         1:A:83:LEU:HB2         1:A:99:LEU:HD12         7         1.28           (1,1582)         1:A:83:LEU:HB2         1:A:99:LEU:HD13         7         1.28           (1,1580)         1:A:78:GLU:H         1:A:79:PRO:HB2         13         1.28           (1,1530)         1:A:78:GLU:H         1:A:79:PRO:HB2         13         1.28           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB2         1:A:68:GLY:HA2         12         1.28           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB1         1:A:139:PHE:HE1         15         1.28           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB2         1:A:30:TYR:HE1         13         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB1         20         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB3         20         1.27           (1,1818)         1:A:10:LEU:HD21         1:A:1	(1,1440)	1:A:70:ALA:HB1	1:A:89:TYR:HD1	7	1.29
(1,1414)         1:A:67:GLN:HG2         1:A:68:GLY:HA2         13         1.29           (1,384)         1:A:14:ARG:H         1:A:20:GLU:HB2         5         1.28           (1,1582)         1:A:83:LEU:HB2         1:A:99:LEU:HD11         7         1.28           (1,1582)         1:A:83:LEU:HB2         1:A:99:LEU:HD12         7         1.28           (1,1582)         1:A:83:LEU:HB2         1:A:99:LEU:HD13         7         1.28           (1,1530)         1:A:78:GLU:H         1:A:79:PRO:HB2         13         1.28           (1,1414)         1:A:67:GLN:HG2         1:A:68:GLY:HA2         12         1.28           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB1         1:A:139:PHE:HE1         15         1.28           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB2         1:A:139:PHE:HE1         15         1.28           (1,750)         1:A:28:GLN:HB2         1:A:30:TYR:HE1         13         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB1         20         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB3         20         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB3         20         1.27           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD21 <td< td=""><td>(1,1440)</td><td>1:A:70:ALA:HB2</td><td>1:A:89:TYR:HD1</td><td>7</td><td>1.29</td></td<>	(1,1440)	1:A:70:ALA:HB2	1:A:89:TYR:HD1	7	1.29
(1,384)         1:A:14:ARG:H         1:A:20:GLU:HB2         5         1.28           (1,1582)         1:A:83:LEU:HB2         1:A:99:LEU:HD11         7         1.28           (1,1582)         1:A:83:LEU:HB2         1:A:99:LEU:HD12         7         1.28           (1,1582)         1:A:83:LEU:HB2         1:A:99:LEU:HD13         7         1.28           (1,1530)         1:A:78:GLU:H         1:A:79:PRO:HB2         13         1.28           (1,1414)         1:A:67:GLN:HG2         1:A:68:GLY:HA2         12         1.28           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB1         1:A:139:PHE:HE1         15         1.28           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB2         1:A:139:PHE:HE1         15         1.28           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB3         1:A:139:PHE:HE1         15         1.28           (1,750)         1:A:28:GLN:HB2         1:A:30:TYR:HE1         13         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB1         20         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB3         20         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB3         20         1.27           (1,1818)         1:A:151:GLU:HB2 <th< td=""><td>(1,1440)</td><td>1:A:70:ALA:HB3</td><td>1:A:89:TYR:HD1</td><td>7</td><td>1.29</td></th<>	(1,1440)	1:A:70:ALA:HB3	1:A:89:TYR:HD1	7	1.29
(1,1582)         1:A:83:LEU:HB2         1:A:99:LEU:HD11         7         1.28           (1,1582)         1:A:83:LEU:HB2         1:A:99:LEU:HD12         7         1.28           (1,1582)         1:A:83:LEU:HB2         1:A:99:LEU:HD13         7         1.28           (1,1530)         1:A:78:GLU:H         1:A:79:PRO:HB2         13         1.28           (1,1414)         1:A:67:GLN:HG2         1:A:68:GLY:HA2         12         1.28           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB1         1:A:139:PHE:HE1         15         1.28           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB2         1:A:139:PHE:HE1         15         1.28           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB3         1:A:139:PHE:HE1         15         1.28           (1,1041)         1:A:410:LEU:HB2	(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA2	13	1.29
(1,1582)         1:A:83:LEU:HB2         1:A:99:LEU:HD12         7         1.28           (1,1582)         1:A:83:LEU:HB2         1:A:99:LEU:HD13         7         1.28           (1,1530)         1:A:78:GLU:H         1:A:79:PRO:HB2         13         1.28           (1,1414)         1:A:67:GLN:HG2         1:A:68:GLY:HA2         12         1.28           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB1         1:A:139:PHE:HE1         15         1.28           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB2         1:A:139:PHE:HE1         15         1.28           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB3         1:A:139:PHE:HE1         15         1.28           (1,750)         1:A:28:GLN:HB2         1:A:30:TYR:HE1         13         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB1         20         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB3         20         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB3         20         1.27           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD21         1:A:109:LEU:HB2         1         1.27           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD22         1:A:109:LEU:HB2         1         1.27           (1,1785)         1:A:99:LEU:HD11	(1,384)	1:A:14:ARG:H	1:A:20:GLU:HB2	5	1.28
(1,1582)         1:A:83:LEU:HB2         1:A:99:LEU:HD13         7         1.28           (1,1530)         1:A:78:GLU:H         1:A:79:PRO:HB2         13         1.28           (1,1414)         1:A:67:GLN:HG2         1:A:68:GLY:HA2         12         1.28           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB1         1:A:139:PHE:HE1         15         1.28           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB2         1:A:139:PHE:HE1         15         1.28           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB3         1:A:139:PHE:HE1         15         1.28           (1,750)         1:A:28:GLN:HB2         1:A:30:TYR:HE1         13         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB1         20         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB3         20         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB3         20         1.27           (1,1818)         1:A:10:LEU:HD21         1:A:109:LEU:HB2         1         1.27           (1,1818)         1:A:10:LEU:HD21         1:A:109:LEU:HB2         1         1.27           (1,1785)         1:A:99:LEU:HD11         1:A:10:LEU:HD21         9         1.27           (1,1785)         1:A:99:LEU:HD11	(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD11	7	1.28
(1,1530)         1:A:78:GLU:H         1:A:79:PRO:HB2         13         1.28           (1,1414)         1:A:67:GLN:HG2         1:A:68:GLY:HA2         12         1.28           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB1         1:A:139:PHE:HE1         15         1.28           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB2         1:A:139:PHE:HE1         15         1.28           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB3         1:A:139:PHE:HE1         15         1.28           (1,750)         1:A:28:GLN:HB2         1:A:30:TYR:HE1         13         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB1         20         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB3         20         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:109:LEU:HB2         1         1.27           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD21         1:A:109:LEU:HB2         1         1.27           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD22         1:A:109:LEU:HB2         1         1.27           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD23         1:A:109:LEU:HB2         1         1.27           (1,1785)         1:A:99:LEU:HD11         1:A:110:LEU:HD21         9         1.27           (1,1785)         1:A:99:LEU:HD12	(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD12	7	1.28
(1,1414)         1:A:67:GLN:HG2         1:A:68:GLY:HA2         12         1.28           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB1         1:A:139:PHE:HE1         15         1.28           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB2         1:A:139:PHE:HE1         15         1.28           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB3         1:A:139:PHE:HE1         15         1.28           (1,750)         1:A:28:GLN:HB2         1:A:30:TYR:HE1         13         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB1         20         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB3         20         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:109:LEU:HB3         20         1.27           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD21         1:A:109:LEU:HB2         1         1.27           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD22         1:A:109:LEU:HB2         1         1.27           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD23         1:A:109:LEU:HB2         1         1.27           (1,1818)         1:A:99:LEU:HD11         1:A:110:LEU:HD21         9         1.27           (1,1785)         1:A:99:LEU:HD11         1:A:110:LEU:HD22         9         1.27           (1,1785)         1:A:99:LEU:HD12<	(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD13	7	1.28
(1,1041)         1:A:40:ALA:HB1         1:A:139:PHE:HE1         15         1.28           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB2         1:A:139:PHE:HE1         15         1.28           (1,1041)         1:A:40:ALA:HB3         1:A:139:PHE:HE1         15         1.28           (1,750)         1:A:28:GLN:HB2         1:A:30:TYR:HE1         13         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB1         20         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB2         20         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB3         20         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:109:LEU:HB2         1         1.27           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD21         1:A:109:LEU:HB2         1         1.27           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD22         1:A:109:LEU:HB2         1         1.27           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD23         1:A:100:LEU:HD21         9         1.27           (1,1785)         1:A:99:LEU:HD11         1:A:110:LEU:HD22         9         1.27           (1,1785)         1:A:99:LEU:HD12         1:A:110:LEU:HD22         9         1.27           (1,1785)         1:A:99:LEU:HD1	(1,1530)	1:A:78:GLU:H	1:A:79:PRO:HB2	13	1.28
(1,1041)       1:A:40:ALA:HB2       1:A:139:PHE:HE1       15       1.28         (1,1041)       1:A:40:ALA:HB3       1:A:139:PHE:HE1       15       1.28         (1,750)       1:A:28:GLN:HB2       1:A:30:TYR:HE1       13       1.27         (1,2419)       1:A:151:GLU:HB2       1:A:153:ALA:HB1       20       1.27         (1,2419)       1:A:151:GLU:HB2       1:A:153:ALA:HB2       20       1.27         (1,2419)       1:A:151:GLU:HB2       1:A:153:ALA:HB3       20       1.27         (1,2419)       1:A:151:GLU:HB2       1:A:10:LEU:HB2       1       1.27         (1,1818)       1:A:10:LEU:HD21       1:A:10:LEU:HB2       1       1.27         (1,1818)       1:A:10:LEU:HD21       1:A:10:LEU:HD21       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27         (1,1785) <td< td=""><td>(1,1414)</td><td>1:A:67:GLN:HG2</td><td>1:A:68:GLY:HA2</td><td>12</td><td>1.28</td></td<>	(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA2	12	1.28
(1,1041)       1:A:40:ALA:HB3       1:A:139:PHE:HE1       15       1.28         (1,750)       1:A:28:GLN:HB2       1:A:30:TYR:HE1       13       1.27         (1,2419)       1:A:151:GLU:HB2       1:A:153:ALA:HB1       20       1.27         (1,2419)       1:A:151:GLU:HB2       1:A:153:ALA:HB2       20       1.27         (1,2419)       1:A:151:GLU:HB2       1:A:153:ALA:HB3       20       1.27         (1,2419)       1:A:151:GLU:HB2       1:A:153:ALA:HB3       20       1.27         (1,2419)       1:A:151:GLU:HB2       1:A:153:ALA:HB3       20       1.27         (1,2419)       1:A:151:GLU:HB2       1:A:109:LEU:HB2       1       1.27         (1,2419)       1:A:151:GLU:HB2       1:A:109:LEU:HB2       1       1.27         (1,2419)       1:A:10:LEU:HD22       1:A:109:LEU:HB2       1       1.27         (1,1818)       1:A:10:LEU:HD23       1:A:100:LEU:HD21       1:A:100:LEU:HD22       1:A:100:LEU:HD22       1:A:100:LEU:HD23       1:A:100:LEU:HD23       1:A:100:LEU:HD24	(1,1041)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:139:PHE:HE1	15	1.28
(1,750)         1:A:28:GLN:HB2         1:A:30:TYR:HE1         13         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB1         20         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB2         20         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB3         20         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:109:LEU:HB2         1         1.27           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD21         1:A:109:LEU:HB2         1         1.27           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD23         1:A:109:LEU:HB2         1         1.27           (1,1818)         1:A:99:LEU:HD11         1:A:110:LEU:HD21         9         1.27           (1,1785)         1:A:99:LEU:HD11         1:A:110:LEU:HD22         9         1.27           (1,1785)         1:A:99:LEU:HD12         1:A:110:LEU:HD21         9         1.27           (1,1785)         1:A:99:LEU:HD12         1:A:110:LEU:HD23         9         1.27           (1,1785)         1:A:99:LEU:HD13         1:A:110:LEU:HD21         9         1.27           (1,1785)         1:A:99:LEU:HD13         1:A:110:LEU:HD22         9         1.27           (1,1785)         1:A:99:LEU:H	(1,1041)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:139:PHE:HE1	15	1.28
(1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB1         20         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB2         20         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB3         20         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB3         20         1.27           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD21         1:A:109:LEU:HB2         1         1.27           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD23         1:A:109:LEU:HB2         1         1.27           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD23         1:A:109:LEU:HD21         9         1.27           (1,1785)         1:A:99:LEU:HD11         1:A:110:LEU:HD22         9         1.27           (1,1785)         1:A:99:LEU:HD12         1:A:110:LEU:HD21         9         1.27           (1,1785)         1:A:99:LEU:HD12         1:A:110:LEU:HD23         9         1.27           (1,1785)         1:A:99:LEU:HD13         1:A:110:LEU:HD21         9         1.27           (1,1785)         1:A:99:LEU:HD13         1:A:110:LEU:HD22         9         1.27           (1,1785)         1:A:99:LEU:HD13         1:A:110:LEU:HD22         9         1.27	(1,1041)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:139:PHE:HE1	15	1.28
(1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB2         20         1.27           (1,2419)         1:A:151:GLU:HB2         1:A:153:ALA:HB3         20         1.27           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD21         1:A:109:LEU:HB2         1         1.27           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD22         1:A:109:LEU:HB2         1         1.27           (1,1818)         1:A:101:LEU:HD23         1:A:109:LEU:HB2         1         1.27           (1,188)         1:A:99:LEU:HD11         1:A:110:LEU:HD21         9         1.27           (1,1785)         1:A:99:LEU:HD11         1:A:110:LEU:HD22         9         1.27           (1,1785)         1:A:99:LEU:HD12         1:A:110:LEU:HD21         9         1.27           (1,1785)         1:A:99:LEU:HD12         1:A:110:LEU:HD23         9         1.27           (1,1785)         1:A:99:LEU:HD12         1:A:110:LEU:HD23         9         1.27           (1,1785)         1:A:99:LEU:HD13         1:A:110:LEU:HD21         9         1.27           (1,1785)         1:A:99:LEU:HD13         1:A:110:LEU:HD22         9         1.27           (1,1785)         1:A:99:LEU:HD13         1:A:110:LEU:HD22         9         1.27	(1,750)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HE1	13	1.27
(1,2419)       1:A:151:GLU:HB2       1:A:153:ALA:HB3       20       1.27         (1,1818)       1:A:101:LEU:HD21       1:A:109:LEU:HB2       1       1.27         (1,1818)       1:A:101:LEU:HD22       1:A:109:LEU:HB2       1       1.27         (1,1818)       1:A:101:LEU:HD23       1:A:109:LEU:HB2       1       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:110:LEU:HD21       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:110:LEU:HD23       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:110:LEU:HD21       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:110:LEU:HD23       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:110:LEU:HD21       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27	(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB1	20	1.27
(1,1818)       1:A:101:LEU:HD21       1:A:109:LEU:HB2       1       1.27         (1,1818)       1:A:101:LEU:HD22       1:A:109:LEU:HB2       1       1.27         (1,1818)       1:A:101:LEU:HD23       1:A:109:LEU:HB2       1       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:110:LEU:HD21       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:110:LEU:HD21       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:110:LEU:HD23       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:110:LEU:HD21       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27	(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB2	20	1.27
(1,1818)       1:A:101:LEU:HD22       1:A:109:LEU:HB2       1       1.27         (1,1818)       1:A:101:LEU:HD23       1:A:109:LEU:HB2       1       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:110:LEU:HD21       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:110:LEU:HD21       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:110:LEU:HD23       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:110:LEU:HD21       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27	(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB3	20	1.27
(1,1818)       1:A:101:LEU:HD23       1:A:109:LEU:HB2       1       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:110:LEU:HD21       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:110:LEU:HD23       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:110:LEU:HD21       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:110:LEU:HD23       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:110:LEU:HD21       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:110:LEU:HD21       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27	(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB2	1	1.27
(1,1818)       1:A:101:LEU:HD23       1:A:109:LEU:HB2       1       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:110:LEU:HD21       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:110:LEU:HD23       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:110:LEU:HD21       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:110:LEU:HD23       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:110:LEU:HD21       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27	(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB2	1	1.27
(1,1785)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:110:LEU:HD21       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:110:LEU:HD23       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:110:LEU:HD21       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:110:LEU:HD23       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:110:LEU:HD21       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27		1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB2	1	1.27
(1,1785)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:110:LEU:HD23       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:110:LEU:HD21       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:110:LEU:HD23       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:110:LEU:HD21       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27		1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HD21	9	1.27
(1,1785)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:110:LEU:HD23       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:110:LEU:HD21       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:110:LEU:HD23       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:110:LEU:HD21       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27		1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HD22	9	1.27
(1,1785)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:110:LEU:HD21       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:110:LEU:HD23       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:110:LEU:HD21       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27	· · /	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HD23	9	1.27
(1,1785)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:110:LEU:HD23       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:110:LEU:HD21       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27	· · /	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HD21	9	1.27
(1,1785)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:110:LEU:HD23       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:110:LEU:HD21       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27		1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HD22	9	1.27
(1,1785)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:110:LEU:HD21       9       1.27         (1,1785)       1:A:99:LEU:HD13       1:A:110:LEU:HD22       9       1.27		1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HD23	9	1.27
(1,1785) 1:A:99:LEU:HD13 1:A:110:LEU:HD22 9 1.27		1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HD21	9	1.27
	(1,1785)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HD22	9	1.27
	(1,1785)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HD23	9	1.27



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1781)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:100:ARG:H	6	1.27
(1,1781)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:100:ARG:H	6	1.27
(1,1781)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:100:ARG:H	6	1.27
(1,1571)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:99:LEU:H	12	1.27
(1,1285)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HA	12	1.27
(1,813)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HB2	16	1.26
(1,405)	1:A:14:ARG:HB2	1:A:23:SER:HB2	7	1.26
(1,384)	1:A:14:ARG:H	1:A:20:GLU:HB2	4	1.26
(1,2311)	1:A:138:MET:HB2	1:A:144:LEU:HB2	8	1.26
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB2	7	1.26
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB2	7	1.26
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB2	7	1.26
(1,1692)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HG2	5	1.26
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD21	4	1.26
	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD22	4	1.26
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD23	4	1.26
(1,384)	1:A:14:ARG:H	1:A:20:GLU:HB2	2	1.25
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD11	20	1.25
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD12	20	1.25
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD13	20	1.25
(1,1688)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HG2	14	1.25
(1,805)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:137:GLY:HA2	14	1.24
(1,367)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HD2	11	1.24
(1,2531)	1:A:165:ARG:HG2	1:A:166:ILE:H	11	1.24
(1,2467)	1:A:160:SER:H	1:A:164:MET:HG2	8	1.24
(1,2459)	1:A:158:GLU:HA	1:A:159:PRO:HG2	5	1.24
(1,1320)	1:A:59:ARG:HG2	1:A:62:GLY:HA2	6	1.24
(1,1092)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:ARG:HG2	15	1.24
(1,1024)	1:A:39:SER:HB2	1:A:46:ARG:HD2	9	1.24
(1,530)	1:A:22:ARG:HD2	1:A:23:SER:H	10	1.23
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG21	14	1.23
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG22	14	1.23
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG23	14	1.23
(1,2578)	1:A:169:GLU:HA	1:A:172:GLU:HG2	20	1.23
(1,2459)	1:A:158:GLU:HA	1:A:159:PRO:HG2	17	1.23
(1,2360)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:143:ASP:H	1	1.23
(1,773)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:30:TYR:H	10	1.22
(1,2530)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:168:GLN:HG2	18	1.22
(1,2310)	1:A:138:MET:HB2	1:A:144:LEU:HG	2	1.22
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:105:GLY:H	1	1.22
(1,1686)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HD2	8	1.22
(1,1680)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:HD2	10	1.22



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	11	1.22
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	11	1.22
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	11	1.22
(1,1246)	1:A:53:GLU:HG2	1:A:54:PRO:HD2	19	1.22
(1,928)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:38:TRP:HD1	16	1.21
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB1	17	1.21
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB2	17	1.21
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB3	17	1.21
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB2	17	1.21
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB2	17	1.21
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB2	17	1.21
(1,1571)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:99:LEU:H	19	1.21
(1,1285)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HA	7	1.21
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD21	14	1.21
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD22	14	1.21
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD23	14	1.21
(1,1121)	1:A:46:ARG:HG2	1:A:139:PHE:HE1	7	1.21
(1,1001)	1:A:38:TRP:HE1	1:A:79:PRO:HG2	10	1.21
(1,805)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:137:GLY:HA2	12	1.2
(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD11	18	1.2
(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD12	18	1.2
(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD13	18	1.2
(1,1320)	1:A:59:ARG:HG2	1:A:62:GLY:HA2	13	1.2
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	3	1.2
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	3	1.2
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	3	1.2
(1,1092)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:ARG:HG2	12	1.2
(1,2311)	1:A:138:MET:HB2	1:A:144:LEU:HB2	2	1.19
(1,1781)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:100:ARG:H	12	1.19
(1,1781)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:100:ARG:H	12	1.19
(1,1781)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:100:ARG:H	12	1.19
(1,1449)	1:A:71:SER:H	1:A:89:TYR:HD1	7	1.19
(1,1426)	1:A:70:ALA:H	1:A:89:TYR:HD1	6	1.19
(1,1286)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HB2	18	1.19
(1,1273)	1:A:55:LYS:HD2	1:A:56:GLY:H	20	1.19
(1,1202)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:129:TRP:HH2	7	1.19
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:139:PHE:HE1	20	1.19
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:139:PHE:HE1	20	1.19
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:139:PHE:HE1	20	1.19
(1,1018)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:39:SER:HB2	12	1.19
(1.707)				
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG21	5	1.18



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG23	5	1.18
(1,270)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:174:TRP:HA	16	1.18
(1,2462)	1:A:158:GLU:HG2	1:A:159:PRO:HD2	14	1.18
(1,2302)	1:A:138:MET:HA	1:A:141:ARG:HB2	11	1.18
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB2	16	1.18
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB2	16	1.18
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB2	16	1.18
(1,1781)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:100:ARG:H	20	1.18
(1,1781)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:100:ARG:H	20	1.18
(1,1781)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:100:ARG:H	20	1.18
(1,1606)	1:A:85:ILE:H	1:A:96:GLU:HG2	5	1.18
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD21	16	1.18
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD22	16	1.18
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD23	16	1.18
(1,1299)	1:A:58:LEU:H	1:A:59:ARG:HG2	3	1.18
(1,1285)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HA	14	1.18
(1,2532)	1:A:165:ARG:HG2	1:A:169:GLU:HG2	16	1.17
(1,1680)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:HD2	15	1.17
(1,1121)	1:A:46:ARG:HG2	1:A:139:PHE:HE1	11	1.17
(1,805)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:137:GLY:HA2	20	1.16
(1,804)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:137:GLY:HA3	15	1.16
(1,2458)	1:A:158:GLU:HA	1:A:159:PRO:HD2	17	1.16
(1,1865)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD11	17	1.16
(1,1865)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD12	17	1.16
(1,1865)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD13	17	1.16
(1,1569)	1:A:82:ARG:HD2	1:A:100:ARG:HB2	13	1.16
(1,1569)	1:A:82:ARG:HD2	1:A:100:ARG:HB2	15	1.16
(1,1285)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HA	11	1.16
(1,1118)	1:A:46:ARG:HD2	1:A:139:PHE:HZ	18	1.16
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG21	4	1.15
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG22	4	1.15
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG23	4	1.15
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG11	1	1.15
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG12	1	1.15
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG13	1	1.15
(1,807)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HG21	18	1.15
(1,807)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HG22	18	1.15
(1,807)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HG23	18	1.15
(1,799)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:H	19	1.15
(1,2636)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:178:VAL:H	13	1.15
(1,2389)	1:A:147:GLY:HA2	1:A:148:PRO:HG2	9	1.15
(1,1867)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:H	19	1.15



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1786)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:111:GLU:H	20	1.15
(1,1786)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:111:GLU:H	20	1.15
(1,1786)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:111:GLU:H	20	1.15
(1,1541)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:81:ARG:HG2	12	1.15
(1,1541)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:81:ARG:HG2	12	1.15
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:139:PHE:HE1	10	1.15
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:139:PHE:HE1	10	1.15
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:139:PHE:HE1	10	1.15
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:139:PHE:HE1	14	1.15
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:139:PHE:HE1	14	1.15
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:139:PHE:HE1	14	1.15
(1,819)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:140:ILE:HD11	1	1.14
(1,819)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:140:ILE:HD12	1	1.14
(1,819)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:140:ILE:HD13	1	1.14
(1,765)	1:A:29:ARG:HA	1:A:30:TYR:HD1	3	1.14
(1,384)	1:A:14:ARG:H	1:A:20:GLU:HB2	8	1.14
(1,2462)	1:A:158:GLU:HG2	1:A:159:PRO:HD2	5	1.14
(1,1863)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:H	5	1.14
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB2	14	1.14
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB2	14	1.14
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB2	14	1.14
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB2	18	1.14
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB2	18	1.14
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB2	18	1.14
(1,1530)	1:A:78:GLU:H	1:A:79:PRO:HB2	2	1.14
(1,1226)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:69:ASN:HD21	11	1.14
(1,1226)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:69:ASN:HD21	11	1.14
(1,1226)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:69:ASN:HD21	11	1.14
(1,1119)	1:A:46:ARG:HD2	1:A:139:PHE:HE1	6	1.14
(1,269)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:174:TRP:HE1	14	1.13
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HB2	7	1.13
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HB2	7	1.13
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HB2	7	1.13
(1,1869)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:HD21	19	1.13
(1,1869)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:HD22	19	1.13
(1,1869)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:HD23	19	1.13
(1,1781)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:100:ARG:H	15	1.13
(1,1781)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:100:ARG:H	15	1.13
(1,1781)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:100:ARG:H	15	1.13
(1,1449)	1:A:71:SER:H	1:A:89:TYR:HD1	3	1.13
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	1	1.13
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	1	1.13



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	1	1.13
(1,1018)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:39:SER:HB2	14	1.13
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG21	8	1.12
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG22	8	1.12
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG23	8	1.12
(1,773)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:30:TYR:H	15	1.12
(1,518)	1:A:22:ARG:H	1:A:23:SER:HB2	14	1.12
(1,346)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:22:ARG:HG2	9	1.12
(1,346)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:22:ARG:HG2	9	1.12
(1,346)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:22:ARG:HG2	9	1.12
(1,2462)	1:A:158:GLU:HG2	1:A:159:PRO:HD2	17	1.12
(1,2257)	1:A:133:LEU:HB2	1:A:136:LEU:HB2	1	1.12
(1,1678)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:H	2	1.12
(1,1245)	1:A:53:GLU:HG2	1:A:54:PRO:HA	5	1.12
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD11	5	1.12
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD12	5	1.12
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD13	5	1.12
(1,813)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HB2	3	1.11
(1,530)	1:A:22:ARG:HD2	1:A:23:SER:H	17	1.11
(1,388)	1:A:14:ARG:H	1:A:22:ARG:HG2	3	1.11
(1,2578)	1:A:169:GLU:HA	1:A:172:GLU:HG2	7	1.11
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:169:GLU:HG2	9	1.11
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:169:GLU:HG2	9	1.11
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:169:GLU:HG2	9	1.11
(1,2310)	1:A:138:MET:HB2	1:A:144:LEU:HG	18	1.11
(1,1789)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:112:LEU:HD11	17	1.11
(1,1789)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:112:LEU:HD12	17	1.11
(1,1789)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:112:LEU:HD13	17	1.11
(1,1789)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:112:LEU:HD11	17	1.11
(1,1789)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:112:LEU:HD12	17	1.11
(1,1789)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:112:LEU:HD13	17	1.11
(1,1789)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:112:LEU:HD11	17	1.11
(1,1789)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:112:LEU:HD12	17	1.11
(1,1789)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:112:LEU:HD13	17	1.11
(1,1686)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HD2	6	1.11
(1,1569)	1:A:82:ARG:HD2	1:A:100:ARG:HB2	12	1.11
(1,1286)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HB2	16	1.11
(1,1246)	1:A:53:GLU:HG2	1:A:54:PRO:HD2	13	1.11
(1,1104)	1:A:46:ARG:H	1:A:47:ILE:HG12	11	1.11
(1,1092)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:ARG:HG2	6	1.11
(1,749)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HD1	1	1.1
(1,558)				



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2418)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:H	9	1.1
(1,1781)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:100:ARG:H	1	1.1
(1,1781)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:100:ARG:H	1	1.1
(1,1781)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:100:ARG:H	1	1.1
(1,1679)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:HB2	12	1.1
(1,1571)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:99:LEU:H	11	1.1
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB1	1:A:89:TYR:HD1	6	1.1
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB2	1:A:89:TYR:HD1	6	1.1
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB3	1:A:89:TYR:HD1	6	1.1
(1,1430)	1:A:70:ALA:HA	1:A:89:TYR:HE1	17	1.1
(1,1369)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:85:ILE:HG21	18	1.1
(1,1369)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:85:ILE:HG22	18	1.1
(1,1369)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:85:ILE:HG23	18	1.1
(1,1245)	1:A:53:GLU:HG2	1:A:54:PRO:HA	9	1.1
(1,1152)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HB2	19	1.1
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD11	15	1.1
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD12	15	1.1
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD13	15	1.1
(1,928)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:38:TRP:HD1	13	1.09
(1,796)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HB	17	1.09
(1,771)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:104:GLU:HG2	5	1.09
(1,706)	1:A:26:ILE:HG21	1:A:28:GLN:HG2	17	1.09
(1,706)	1:A:26:ILE:HG22	1:A:28:GLN:HG2	17	1.09
(1,706)	1:A:26:ILE:HG23	1:A:28:GLN:HG2	17	1.09
(1,2421)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:H	7	1.09
(1,2360)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:143:ASP:H	14	1.09
(1,1530)	1:A:78:GLU:H	1:A:79:PRO:HB2	17	1.09
(1,1072)	1:A:43:ASP:HB2	1:A:46:ARG:HG2	15	1.09
(1,1030)	1:A:40:ALA:H	1:A:46:ARG:HD2	13	1.09
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD11	20	1.09
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD12	20	1.09
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD13	20	1.09
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG21	3	1.08
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG22	3	1.08
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG23	3	1.08
(1,765)	1:A:29:ARG:HA	1:A:30:TYR:HD1	1	1.08
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD21	13	1.08
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD22	13	1.08
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD23	13	1.08
(1,518)	1:A:22:ARG:H	1:A:23:SER:HB2	7	1.08
(1,384)	1:A:14:ARG:H	1:A:20:GLU:HB2	16	1.08
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB1	6	1.08



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB2	6	1.08
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB3	6	1.08
(1,2418)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:H	11	1.08
(1,2360)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:143:ASP:H	5	1.08
(1,2360)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:143:ASP:H	19	1.08
(1,2257)	1:A:133:LEU:HB2	1:A:136:LEU:HB2	4	1.08
(1,2257)	1:A:133:LEU:HB2	1:A:136:LEU:HB2	7	1.08
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB2	11	1.08
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB2	11	1.08
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB2	11	1.08
(1,1534)	1:A:78:GLU:H	1:A:82:ARG:HG2	15	1.08
(1,1205)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:52:ILE:H	17	1.08
(1,928)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:38:TRP:HD1	6	1.07
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD21	16	1.07
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD22	16	1.07
(1,815)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD23	16	1.07
(1,805)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:137:GLY:HA2	2	1.07
(1,802)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HB2	19	1.07
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG21	16	1.07
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG22	16	1.07
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG23	16	1.07
(1,518)	1:A:22:ARG:H	1:A:23:SER:HB2	6	1.07
(1,2531)	1:A:165:ARG:HG2	1:A:166:ILE:H	14	1.07
(1,2257)	1:A:133:LEU:HB2	1:A:136:LEU:HB2	3	1.07
(1,1245)	1:A:53:GLU:HG2	1:A:54:PRO:HA	7	1.07
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	2	1.07
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	2	1.07
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	2	1.07
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD11	20	1.06
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD12	20	1.06
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD13	20	1.06
(1,642)	1:A:25:ILE:HG21	1:A:113:GLU:HB2	14	1.06
(1,642)	1:A:25:ILE:HG22	1:A:113:GLU:HB2	14	1.06
(1,642)	1:A:25:ILE:HG23	1:A:113:GLU:HB2	14	1.06
(1,518)	1:A:22:ARG:H	1:A:23:SER:HB2	16	1.06
(1,269)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:174:TRP:HE1	16	1.06
(1,2283)	1:A:136:LEU:HG	1:A:140:ILE:HG12	14	1.06
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:105:GLY:H	2	1.06
(1,1786)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:111:GLU:H	6	1.06
(1,1786)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:111:GLU:H	6	1.06
(1,1786)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:111:GLU:H	6	1.06
(1,1530)	1:A:78:GLU:H	1:A:79:PRO:HB2	5	1.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1245)	1:A:53:GLU:HG2	1:A:54:PRO:HA	14	1.06
(1,1001)	1:A:38:TRP:HE1	1:A:79:PRO:HG2	18	1.06
(1,545)	1:A:23:SER:HB2	1:A:113:GLU:HG2	8	1.05
(1,530)	1:A:22:ARG:HD2	1:A:23:SER:H	4	1.05
(1,333)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:181:GLY:HA2	9	1.05
(1,333)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:181:GLY:HA2	9	1.05
(1,333)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:181:GLY:HA2	9	1.05
(1,2530)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:168:GLN:HG2	1	1.05
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	17	1.05
(1,1388)	1:A:66:LEU:H	1:A:71:SER:HB2	1	1.05
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:56:GLY:H	3	1.05
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	6	1.05
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	6	1.05
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	6	1.05
(1,1153)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HG2	18	1.05
(1,1153)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HG2	19	1.05
(1,1104)	1:A:46:ARG:H	1:A:47:ILE:HG12	20	1.05
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD11	8	1.05
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD12	8	1.05
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD13	8	1.05
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD11	18	1.05
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD12	18	1.05
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD13	18	1.05
(1,808)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:31:ASP:H	2	1.04
(1,603)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:114:HIS:HB2	9	1.04
(1,603)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:114:HIS:HB2	9	1.04
(1,603)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:114:HIS:HB2	9	1.04
(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG21	16	1.04
(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG22	16	1.04
(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG23	16	1.04
(1,2257)	1:A:133:LEU:HB2	1:A:136:LEU:HB2	8	1.04
(1,2257)	1:A:133:LEU:HB2	1:A:136:LEU:HB2	17	1.04
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HB2	14	1.04
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HB2	14	1.04
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HB2	14	1.04
(1,1092)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:ARG:HG2	17	1.04
(1,996)	1:A:38:TRP:HD1	1:A:80:PRO:HB2	20	1.03
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG21	1	1.03
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG22	1	1.03
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG23	1	1.03
(1,264)	1:A:9:ARG:HB2	1:A:177:LEU:HD21	9	1.03
(1,264)	1:A:9:ARG:HB2	1:A:177:LEU:HD22	9	1.03



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,264)	1:A:9:ARG:HB2	1:A:177:LEU:HD23	9	1.03
(1,2547)	1:A:166:ILE:HB	1:A:169:GLU:HG2	2	1.03
(1,2531)	1:A:165:ARG:HG2	1:A:166:ILE:H	10	1.03
(1,2531)	1:A:165:ARG:HG2	1:A:166:ILE:H	17	1.03
(1,2477)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HG2	18	1.03
(1,2178)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:131:MET:HG2	1	1.03
(1,2178)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:131:MET:HG2	1	1.03
(1,2178)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:131:MET:HG2	1	1.03
(1,1867)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:H	8	1.03
(1,1273)	1:A:55:LYS:HD2	1:A:56:GLY:H	5	1.03
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG2	7	1.02
(1,808)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:31:ASP:H	6	1.02
(1,2531)	1:A:165:ARG:HG2	1:A:166:ILE:H	5	1.02
(1,2531)	1:A:165:ARG:HG2	1:A:166:ILE:H	20	1.02
(1,2526)	1:A:165:ARG:HA	1:A:168:GLN:HG2	11	1.02
(1,2302)	1:A:138:MET:HA	1:A:141:ARG:HB2	3	1.02
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:105:GLY:H	8	1.02
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB2	12	1.02
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB2	12	1.02
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB2	12	1.02
(1,1680)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:HD2	13	1.02
(1,1388)	1:A:66:LEU:H	1:A:71:SER:HB2	3	1.02
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	4	1.02
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	4	1.02
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	4	1.02
(1,1245)	1:A:53:GLU:HG2	1:A:54:PRO:HA	19	1.02
(1,1104)	1:A:46:ARG:H	1:A:47:ILE:HG12	16	1.02
(1,805)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:137:GLY:HA2	7	1.01
(1,747)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HB2	8	1.01
(1,603)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:114:HIS:HB2	12	1.01
(1,603)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:114:HIS:HB2	12	1.01
(1,603)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:114:HIS:HB2	12	1.01
(1,423)	1:A:15:THR:HG21	1:A:20:GLU:HG2	11	1.01
(1,423)	1:A:15:THR:HG22	1:A:20:GLU:HG2	11	1.01
(1,423)	1:A:15:THR:HG23	1:A:20:GLU:HG2	11	1.01
(1,2591)	1:A:171:GLY:H	1:A:172:GLU:HG2	12	1.01
(1,2421)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:H	6	1.01
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HB2	17	1.01
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HB2	17	1.01
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HB2	17	1.01
(1,1865)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD11	18	1.01
(1,1865)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD12	18	1.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1865)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD13	18	1.01
(1,1860)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:107:GLY:H	19	1.01
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	3	1.01
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	11	1.01
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	14	1.01
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	19	1.01
(1,1781)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:100:ARG:H	11	1.01
(1,1781)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:100:ARG:H	11	1.01
(1,1781)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:100:ARG:H	11	1.01
(1,1678)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:H	9	1.01
(1,1366)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:72:GLY:HA2	18	1.01
(1,1088)	1:A:44:PRO:HG2	1:A:45:ASN:HB2	13	1.01
(1,1054)	1:A:41:CYS:H	1:A:99:LEU:HD11	2	1.01
(1,1054)	1:A:41:CYS:H	1:A:99:LEU:HD12	2	1.01
(1,1054)	1:A:41:CYS:H	1:A:99:LEU:HD13	2	1.01
(1,750)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HE1	3	1.0
(1,2636)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:178:VAL:H	1	1.0
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD11	12	1.0
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD12	12	1.0
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD13	12	1.0
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB1	9	1.0
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB2	9	1.0
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB3	9	1.0
(1,2360)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:143:ASP:H	9	1.0
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:105:GLY:H	5	1.0
(1,1285)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HA	6	1.0
(1,1285)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HA	10	1.0
(1,1246)	1:A:53:GLU:HG2	1:A:54:PRO:HD2	5	1.0
(1,1246)	1:A:53:GLU:HG2	1:A:54:PRO:HD2	17	1.0
(1,1245)	1:A:53:GLU:HG2	1:A:54:PRO:HA	13	1.0
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD21	1	1.0
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD22	1	1.0
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD23	1	1.0
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD21	13	1.0
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD22	13	1.0
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD23	13	1.0
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE1	19	1.0
(1,1153)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HG2	16	1.0
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:130:GLU:HB2	9	0.99
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:130:GLU:HB2	9	0.99
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:130:GLU:HB2	9	0.99
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:130:GLU:HB2	10	0.99



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:130:GLU:HB2	10	0.99
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:130:GLU:HB2	10	0.99
(1,1688)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HG2	12	0.99
(1,1330)	1:A:60:GLU:HG2	1:A:77:CYS:H	7	0.99
(1,850)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:HG2	4	0.98
(1,850)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:HG2	4	0.98
(1,850)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:HG2	4	0.98
(1,706)	1:A:26:ILE:HG21	1:A:28:GLN:HG2	5	0.98
(1,706)	1:A:26:ILE:HG22	1:A:28:GLN:HG2	5	0.98
(1,706)	1:A:26:ILE:HG23	1:A:28:GLN:HG2	5	0.98
(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG21	17	0.98
(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG22	17	0.98
(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG23	17	0.98
(1,2636)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:178:VAL:H	19	0.98
(1,2477)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HG2	1	0.98
(1,2477)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HG2	9	0.98
(1,1685)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:H	18	0.98
(1,1429)	1:A:70:ALA:HA	1:A:89:TYR:HD1	17	0.98
(1,1245)	1:A:53:GLU:HG2	1:A:54:PRO:HA	20	0.98
(1,1238)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:67:GLN:HG2	18	0.98
(1,1238)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:67:GLN:HG2	18	0.98
(1,1238)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:67:GLN:HG2	18	0.98
(1,1030)	1:A:40:ALA:H	1:A:46:ARG:HD2	1	0.98
(1,765)	1:A:29:ARG:HA	1:A:30:TYR:HD1	11	0.97
(1,603)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:114:HIS:HB2	16	0.97
(1,603)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:114:HIS:HB2	16	0.97
(1,603)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:114:HIS:HB2	16	0.97
(1,518)	1:A:22:ARG:H	1:A:23:SER:HB2	17	0.97
(1,272)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:174:TRP:HH2	10	0.97
(1,268)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:173:ALA:HB1	6	0.97
(1,268)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:173:ALA:HB2	6	0.97
(1,268)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:173:ALA:HB3	6	0.97
(1,2636)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:178:VAL:H	17	0.97
(1,2531)	1:A:165:ARG:HG2	1:A:166:ILE:H	4	0.97
(1,1868)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:HB2	19	0.97
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	2	0.97
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB2	20	0.97
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB2	20	0.97
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB2	20	0.97
(1,1092)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:ARG:HG2	9	0.97
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:139:PHE:HE1	16	0.97
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:139:PHE:HE1	16	0.97



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:139:PHE:HE1	16	0.97
(1,820)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:37:VAL:HG11	10	0.96
(1,820)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:37:VAL:HG12	10	0.96
(1,820)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:37:VAL:HG13	10	0.96
(1,771)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:104:GLU:HG2	1	0.96
(1,530)	1:A:22:ARG:HD2	1:A:23:SER:H	20	0.96
(1,384)	1:A:14:ARG:H	1:A:20:GLU:HB2	20	0.96
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:169:GLU:HG2	17	0.96
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:169:GLU:HG2	17	0.96
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:169:GLU:HG2	17	0.96
(1,2462)	1:A:158:GLU:HG2	1:A:159:PRO:HD2	20	0.96
(1,2442)	1:A:155:GLU:HB2	1:A:156:GLU:H	5	0.96
(1,2257)	1:A:133:LEU:HB2	1:A:136:LEU:HB2	2	0.96
(1,2230)	1:A:131:MET:HE1	1:A:167:SER:HB2	1	0.96
(1,2230)	1:A:131:MET:HE2	1:A:167:SER:HB2	1	0.96
(1,2230)	1:A:131:MET:HE3	1:A:167:SER:HB2	1	0.96
(1,1678)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:H	13	0.96
(1,1674)	1:A:89:TYR:HA	1:A:90:GLU:HB2	18	0.96
(1,1320)	1:A:59:ARG:HG2	1:A:62:GLY:HA2	14	0.96
(1,1202)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:129:TRP:HH2	13	0.96
(1,1109)	1:A:46:ARG:HA	1:A:49:ARG:HD2	20	0.96
(1,1056)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:42:THR:HG21	10	0.96
(1,1056)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:42:THR:HG22	10	0.96
(1,1056)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:42:THR:HG23	10	0.96
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG21	4	0.95
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG22	4	0.95
(1,797)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HG23	4	0.95
(1,773)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:30:TYR:H	5	0.95
(1,771)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:104:GLU:HG2	2	0.95
(1,269)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:174:TRP:HE1	11	0.95
(1,2421)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:H	9	0.95
(1,1680)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:HD2	5	0.95
(1,1530)	1:A:78:GLU:H	1:A:79:PRO:HB2	3	0.95
(1,1167)	1:A:49:ARG:HG2	1:A:139:PHE:HZ	17	0.95
(1,1092)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:ARG:HG2	3	0.95
(1,1092)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:ARG:HG2	11	0.95
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD11	13	0.94
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD12	13	0.94
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD13	13	0.94
(1,603)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:114:HIS:HB2	14	0.94
(1,603)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:114:HIS:HB2	14	0.94
(1,603)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:114:HIS:HB2	14	0.94



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,518)	1:A:22:ARG:H	1:A:23:SER:HB2	5	0.94
(1,518)	1:A:22:ARG:H	1:A:23:SER:HB2	9	0.94
(1,388)	1:A:14:ARG:H	1:A:22:ARG:HG2	12	0.94
(1,2477)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HG2	20	0.94
(1,2442)	1:A:155:GLU:HB2	1:A:156:GLU:H	9	0.94
(1,2442)	1:A:155:GLU:HB2	1:A:156:GLU:H	13	0.94
(1,2362)	1:A:141:ARG:HG2	1:A:142:GLY:H	5	0.94
(1,2360)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:143:ASP:H	10	0.94
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	8	0.94
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	12	0.94
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	16	0.94
(1,1786)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:111:GLU:H	12	0.94
(1,1786)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:111:GLU:H	12	0.94
(1,1786)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:111:GLU:H	12	0.94
(1,1691)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HE2	17	0.94
(1,1674)	1:A:89:TYR:HA	1:A:90:GLU:HB2	9	0.94
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD21	11	0.94
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD22	11	0.94
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD23	11	0.94
(1,1246)	1:A:53:GLU:HG2	1:A:54:PRO:HD2	20	0.94
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD21	19	0.94
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD22	19	0.94
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD23	19	0.94
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	11	0.94
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	11	0.94
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	11	0.94
(1,1205)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:52:ILE:H	13	0.94
(1,1153)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HG2	12	0.94
(1,1092)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:ARG:HG2	18	0.94
(1,819)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:140:ILE:HD11	14	0.93
(1,819)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:140:ILE:HD12	14	0.93
(1,819)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:140:ILE:HD13	14	0.93
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD11	2	0.93
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD12	2	0.93
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD13	2	0.93
(1,765)	1:A:29:ARG:HA	1:A:30:TYR:HD1	10	0.93
(1,518)	1:A:22:ARG:H	1:A:23:SER:HB2	11	0.93
(1,518)	1:A:22:ARG:H	1:A:23:SER:HB2	18	0.93
(1,411)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:23:SER:HB2	20	0.93
(1,272)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:174:TRP:HH2	18	0.93
(1,270)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:174:TRP:HA	3	0.93
(1,270)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:174:TRP:HA	7	0.93



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2257)	1:A:133:LEU:HB2	1:A:136:LEU:HB2	6	0.93
(1,1861)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:108:THR:H	17	0.93
(1,1692)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HG2	14	0.93
(1,1601)	1:A:84:THR:HG21	1:A:98:GLU:HB2	3	0.93
(1,1601)	1:A:84:THR:HG22	1:A:98:GLU:HB2	3	0.93
(1,1601)	1:A:84:THR:HG23	1:A:98:GLU:HB2	3	0.93
(1,1420)	1:A:69:ASN:HA	1:A:89:TYR:HE1	3	0.93
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD21	10	0.93
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD22	10	0.93
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD23	10	0.93
(1,1153)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HG2	3	0.93
(1,1114)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HE1	16	0.93
(1,2594)	1:A:172:GLU:H	1:A:172:GLU:HG2	12	0.92
(1,2492)	1:A:163:MET:H	1:A:164:MET:HG2	9	0.92
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB1	9	0.92
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB2	9	0.92
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB3	9	0.92
(1,1864)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HB2	17	0.92
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	5	0.92
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB2	9	0.92
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB2	9	0.92
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB2	9	0.92
(1,1680)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:HD2	19	0.92
(1,1518)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:84:THR:H	3	0.92
(1,1449)	1:A:71:SER:H	1:A:89:TYR:HD1	6	0.92
(1,1345)	1:A:63:ASN:HA	1:A:74:ILE:HG12	1	0.92
(1,1285)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HA	15	0.92
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	10	0.92
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	10	0.92
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	10	0.92
(1,1121)	1:A:46:ARG:HG2	1:A:139:PHE:HE1	9	0.92
(1,1056)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:42:THR:HG21	4	0.92
(1,1056)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:42:THR:HG22	4	0.92
(1,1056)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:42:THR:HG23	4	0.92
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG2	10	0.91
(1,841)	1:A:32:ALA:HA	1:A:36:GLU:HB2	20	0.91
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG21	17	0.91
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG22	17	0.91
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG23	17	0.91
(1,518)	1:A:22:ARG:H	1:A:23:SER:HB2	3	0.91
(1,2636)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:178:VAL:H	9	0.91
(1,2531)	1:A:165:ARG:HG2	1:A:166:ILE:H	18	0.91



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2507)	1:A:164:MET:H	1:A:164:MET:HG2	9	0.91
(1,2467)	1:A:160:SER:H	1:A:164:MET:HG2	6	0.91
(1,2381)	1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:PRO:HD2	15	0.91
(1,2381)	1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:PRO:HD2	15	0.91
(1,2381)	1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:PRO:HD2	15	0.91
(1,2257)	1:A:133:LEU:HB2	1:A:136:LEU:HB2	18	0.91
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	4	0.91
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB2	15	0.91
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB2	15	0.91
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB2	15	0.91
(1,1286)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HB2	7	0.91
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:56:GLY:H	19	0.91
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:139:PHE:HE1	5	0.91
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:139:PHE:HE1	5	0.91
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:139:PHE:HE1	5	0.91
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD11	6	0.9
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD12	6	0.9
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD13	6	0.9
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG21	3	0.9
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG22	3	0.9
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG23	3	0.9
(1,766)	1:A:29:ARG:HE	1:A:104:GLU:HB2	6	0.9
(1,335)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:22:ARG:HD2	13	0.9
(1,335)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:22:ARG:HD2	13	0.9
(1,335)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:22:ARG:HD2	13	0.9
(1,322)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:25:ILE:HD11	12	0.9
(1,322)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:25:ILE:HD12	12	0.9
(1,322)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:25:ILE:HD13	12	0.9
(1,2578)	1:A:169:GLU:HA	1:A:172:GLU:HG2	6	0.9
(1,2578)	1:A:169:GLU:HA	1:A:172:GLU:HG2	19	0.9
(1,2550)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:170:ARG:HG2	13	0.9
(1,2550)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:170:ARG:HG2	13	0.9
(1,2550)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:170:ARG:HG2	13	0.9
(1,2477)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HG2	4	0.9
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB1	16	0.9
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB2	16	0.9
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB3	16	0.9
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:130:GLU:HB2	20	0.9
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:130:GLU:HB2	20	0.9
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:130:GLU:HB2	20	0.9
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	13	0.9
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	13	0.9



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	13	0.9
(1,1345)	1:A:63:ASN:HA	1:A:74:ILE:HG12	19	0.9
(1,1245)	1:A:53:GLU:HG2	1:A:54:PRO:HA	10	0.9
(1,1245)	1:A:53:GLU:HG2	1:A:54:PRO:HA	11	0.9
(1,1088)	1:A:44:PRO:HG2	1:A:45:ASN:HB2	12	0.9
(1,1088)	1:A:44:PRO:HG2	1:A:45:ASN:HB2	16	0.9
(1,1024)	1:A:39:SER:HB2	1:A:46:ARG:HD2	10	0.9
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD11	15	0.89
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD12	15	0.89
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD13	15	0.89
(1,706)	1:A:26:ILE:HG21	1:A:28:GLN:HG2	2	0.89
(1,706)	1:A:26:ILE:HG22	1:A:28:GLN:HG2	2	0.89
(1,706)	1:A:26:ILE:HG23	1:A:28:GLN:HG2	2	0.89
(1,269)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:174:TRP:HE1	7	0.89
(1,2636)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:178:VAL:H	4	0.89
(1,2161)	1:A:126:GLY:HA2	1:A:174:TRP:HZ3	8	0.89
(1,1674)	1:A:89:TYR:HA	1:A:90:GLU:HB2	5	0.89
(1,1610)	1:A:85:ILE:H	1:A:98:GLU:HB2	16	0.89
(1,1571)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:99:LEU:H	5	0.89
(1,1532)	1:A:78:GLU:H	1:A:81:ARG:HB2	15	0.89
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	17	0.89
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	17	0.89
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	17	0.89
(1,841)	1:A:32:ALA:HA	1:A:36:GLU:HB2	16	0.88
(1,774)	1:A:29:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HB2	14	0.88
(1,346)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:22:ARG:HG2	7	0.88
(1,346)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:22:ARG:HG2	7	0.88
(1,346)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:22:ARG:HG2	7	0.88
(1,2636)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:178:VAL:H	2	0.88
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:169:GLU:HG2	3	0.88
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:169:GLU:HG2	3	0.88
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:169:GLU:HG2	3	0.88
(1,2350)	1:A:140:ILE:HG21	1:A:141:ARG:HG2	15	0.88
(1,2350)	1:A:140:ILE:HG22	1:A:141:ARG:HG2	15	0.88
(1,2350)	1:A:140:ILE:HG23	1:A:141:ARG:HG2	15	0.88
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:130:GLU:HB2	16	0.88
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:130:GLU:HB2	16	0.88
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:130:GLU:HB2	16	0.88
(1,217)	1:A:7:THR:HG21	1:A:27:ARG:HB2	13	0.88
(1,217)	1:A:7:THR:HG22	1:A:27:ARG:HB2	13	0.88
(1,217)	1:A:7:THR:HG23	1:A:27:ARG:HB2	13	0.88
(1,1692)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HG2	12	0.88



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA2	18	0.88
(1,1345)	1:A:63:ASN:HA	1:A:74:ILE:HG12	4	0.88
(1,1273)	1:A:55:LYS:HD2	1:A:56:GLY:H	7	0.88
(1,1238)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:67:GLN:HG2	9	0.88
(1,1238)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:67:GLN:HG2	9	0.88
(1,1238)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:67:GLN:HG2	9	0.88
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG11	19	0.87
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG12	19	0.87
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG13	19	0.87
(1,808)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:31:ASP:H	7	0.87
(1,796)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HB	9	0.87
(1,2636)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:178:VAL:H	18	0.87
(1,2334)	1:A:139:PHE:HD1	1:A:140:ILE:HG12	14	0.87
(1,2334)	1:A:139:PHE:HD2	1:A:140:ILE:HG12	14	0.87
(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD11	5	0.87
(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD12	5	0.87
(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD13	5	0.87
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:130:GLU:HB2	2	0.87
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:130:GLU:HB2	2	0.87
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:130:GLU:HB2	2	0.87
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:105:GLY:H	20	0.87
(1,1781)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:100:ARG:H	4	0.87
(1,1781)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:100:ARG:H	4	0.87
(1,1781)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:100:ARG:H	4	0.87
(1,1678)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:H	19	0.87
(1,1541)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:81:ARG:HG2	18	0.87
(1,1541)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:81:ARG:HG2	18	0.87
(1,1530)	1:A:78:GLU:H	1:A:79:PRO:HB2	4	0.87
(1,1367)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:85:ILE:HB	18	0.87
(1,1060)	1:A:42:THR:H	1:A:43:ASP:HB2	12	0.87
(1,808)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:31:ASP:H	20	0.86
(1,518)	1:A:22:ARG:H	1:A:23:SER:HB2	1	0.86
(1,458)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:18:ALA:H	3	0.86
(1,2465)	1:A:159:PRO:HG2	1:A:160:SER:H	1	0.86
(1,2458)	1:A:158:GLU:HA	1:A:159:PRO:HD2	5	0.86
(1,2257)	1:A:133:LEU:HB2	1:A:136:LEU:HB2	19	0.86
(1,2161)	1:A:126:GLY:HA2	1:A:174:TRP:HZ3	1	0.86
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HB2	4	0.86
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HB2	4	0.86
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HB2	4	0.86
(1,1285)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HA	3	0.86
(1,1214)	1:A:52:ILE:HA	1:A:53:GLU:HB2	9	0.86



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1214)	1:A:52:ILE:HA	1:A:53:GLU:HB2	11	0.86
(1,1151)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HA	14	0.86
(1,1088)	1:A:44:PRO:HG2	1:A:45:ASN:HB2	2	0.86
(1,771)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:104:GLU:HG2	17	0.85
(1,747)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HB2	18	0.85
(1,642)	1:A:25:ILE:HG21	1:A:113:GLU:HB2	4	0.85
(1,642)	1:A:25:ILE:HG22	1:A:113:GLU:HB2	4	0.85
(1,642)	1:A:25:ILE:HG23	1:A:113:GLU:HB2	4	0.85
(1,496)	1:A:20:GLU:HG2	1:A:21:ALA:H	1	0.85
(1,333)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:181:GLY:HA2	14	0.85
(1,333)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:181:GLY:HA2	14	0.85
(1,333)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:181:GLY:HA2	14	0.85
(1,272)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:174:TRP:HH2	3	0.85
(1,2594)	1:A:172:GLU:H	1:A:172:GLU:HG2	3	0.85
(1,255)	1:A:9:ARG:HE	1:A:130:GLU:HG2	5	0.85
(1,1381)	1:A:65:ALA:HB1	1:A:71:SER:HB2	3	0.85
(1,1381)	1:A:65:ALA:HB2	1:A:71:SER:HB2	3	0.85
(1,1381)	1:A:65:ALA:HB3	1:A:71:SER:HB2	3	0.85
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:56:GLY:H	1	0.85
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:56:GLY:H	20	0.85
(1,1214)	1:A:52:ILE:HA	1:A:53:GLU:HB2	2	0.85
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD21	6	0.85
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD22	6	0.85
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD23	6	0.85
(1,1118)	1:A:46:ARG:HD2	1:A:139:PHE:HZ	4	0.85
(1,383)	1:A:13:ARG:HG2	1:A:14:ARG:HA	18	0.84
(1,2547)	1:A:166:ILE:HB	1:A:169:GLU:HG2	19	0.84
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:112:LEU:H	6	0.84
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:112:LEU:H	6	0.84
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:112:LEU:H	6	0.84
(1,1786)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:111:GLU:H	14	0.84
(1,1786)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:111:GLU:H	14	0.84
(1,1786)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:111:GLU:H	14	0.84
(1,1530)	1:A:78:GLU:H	1:A:79:PRO:HB2	19	0.84
(1,1286)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HB2	12	0.84
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD21	2	0.84
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD22	2	0.84
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD23	2	0.84
(1,1155)	1:A:49:ARG:H	1:A:49:ARG:HD2	20	0.84
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD11	15	0.83
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD12	15	0.83
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD13	15	0.83



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,850)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:HG2	2	0.83
(1,850)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:HG2	2	0.83
(1,850)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:HG2	2	0.83
(1,255)	1:A:9:ARG:HE	1:A:130:GLU:HG2	3	0.83
(1,2492)	1:A:163:MET:H	1:A:164:MET:HG2	4	0.83
(1,2465)	1:A:159:PRO:HG2	1:A:160:SER:H	10	0.83
(1,2360)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:143:ASP:H	3	0.83
(1,2360)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:143:ASP:H	11	0.83
(1,2257)	1:A:133:LEU:HB2	1:A:136:LEU:HB2	13	0.83
(1,194)	1:A:5:GLN:H	1:A:5:GLN:HG2	6	0.83
(1,1863)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:H	18	0.83
(1,1690)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:90:GLU:HB2	11	0.83
(1,1594)	1:A:84:THR:HA	1:A:98:GLU:HB2	3	0.83
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD21	14	0.83
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD22	14	0.83
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD23	14	0.83
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	1	0.83
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	1	0.83
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	1	0.83
(1,1092)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:ARG:HG2	16	0.83
(1,1072)	1:A:43:ASP:HB2	1:A:46:ARG:HG2	11	0.83
(1,1056)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:42:THR:HG21	13	0.83
(1,1056)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:42:THR:HG22	13	0.83
(1,1056)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:42:THR:HG23	13	0.83
(1,928)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:38:TRP:HD1	14	0.82
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG21	15	0.82
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG22	15	0.82
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG23	15	0.82
(1,796)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HB	16	0.82
(1,518)	1:A:22:ARG:H	1:A:23:SER:HB2	10	0.82
(1,269)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:174:TRP:HE1	2	0.82
(1,2465)	1:A:159:PRO:HG2	1:A:160:SER:H	19	0.82
(1,2420)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:152:ASP:H	5	0.82
(1,2418)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:H	6	0.82
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	18	0.82
(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD11	1	0.82
(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD12	1	0.82
(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD13	1	0.82
(1,1214)	1:A:52:ILE:HA	1:A:53:GLU:HB2	10	0.82
(1,1214)	1:A:52:ILE:HA	1:A:53:GLU:HB2	20	0.82
(1,1151)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HA	10	0.82
(1,1088)	1:A:44:PRO:HG2	1:A:45:ASN:HB2	10	0.82



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1072)	1:A:43:ASP:HB2	1:A:46:ARG:HG2	3	0.82
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD11	7	0.82
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD12	7	0.82
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD13	7	0.82
(1,808)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:31:ASP:H	14	0.81
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD11	4	0.81
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD12	4	0.81
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD13	4	0.81
(1,518)	1:A:22:ARG:H	1:A:23:SER:HB2	19	0.81
(1,2068)	1:A:121:MET:HG2	1:A:125:VAL:HG11	16	0.81
(1,2068)	1:A:121:MET:HG2	1:A:125:VAL:HG12	16	0.81
(1,2068)	1:A:121:MET:HG2	1:A:125:VAL:HG13	16	0.81
(1,1864)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HB2	18	0.81
(1,1861)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:108:THR:H	5	0.81
(1,1789)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:112:LEU:HD11	9	0.81
(1,1789)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:112:LEU:HD12	9	0.81
(1,1789)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:112:LEU:HD13	9	0.81
(1,1789)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:112:LEU:HD11	9	0.81
(1,1789)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:112:LEU:HD12	9	0.81
(1,1789)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:112:LEU:HD13	9	0.81
(1,1789)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:112:LEU:HD11	9	0.81
(1,1789)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:112:LEU:HD12	9	0.81
(1,1789)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:112:LEU:HD13	9	0.81
(1,1518)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:84:THR:H	13	0.81
(1,1467)	1:A:74:ILE:H	1:A:74:ILE:HG12	1	0.81
(1,1467)	1:A:74:ILE:H	1:A:74:ILE:HG12	2	0.81
(1,1467)	1:A:74:ILE:H	1:A:74:ILE:HG12	4	0.81
(1,1467)	1:A:74:ILE:H	1:A:74:ILE:HG12	19	0.81
(1,1286)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HB2	11	0.81
(1,1285)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HA	9	0.81
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:56:GLY:H	2	0.81
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:56:GLY:H	4	0.81
(1,1214)	1:A:52:ILE:HA	1:A:53:GLU:HB2	14	0.81
(1,1214)	1:A:52:ILE:HA	1:A:53:GLU:HB2	17	0.81
(1,1092)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:ARG:HG2	14	0.81
(1,1088)	1:A:44:PRO:HG2	1:A:45:ASN:HB2	17	0.81
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:139:PHE:HE1	1	0.81
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:139:PHE:HE1	1	0.81
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:139:PHE:HE1	1	0.81
(1,752)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD11	11	0.8
(1,752)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD12	11	0.8
(1,752)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD13	11	0.8



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2636)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:178:VAL:H	3	0.8
(1,2505)	1:A:163:MET:HE1	1:A:167:SER:HB2	5	0.8
(1,2505)	1:A:163:MET:HE2	1:A:167:SER:HB2	5	0.8
(1,2505)	1:A:163:MET:HE3	1:A:167:SER:HB2	5	0.8
(1,2457)	1:A:158:GLU:HA	1:A:158:GLU:HG2	12	0.8
(1,2442)	1:A:155:GLU:HB2	1:A:156:GLU:H	4	0.8
(1,2359)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:141:ARG:HD2	9	0.8
(1,2068)	1:A:121:MET:HG2	1:A:125:VAL:HG11	12	0.8
(1,2068)	1:A:121:MET:HG2	1:A:125:VAL:HG12	12	0.8
(1,2068)	1:A:121:MET:HG2	1:A:125:VAL:HG13	12	0.8
(1,1381)	1:A:65:ALA:HB1	1:A:71:SER:HB2	4	0.8
(1,1381)	1:A:65:ALA:HB2	1:A:71:SER:HB2	4	0.8
(1,1381)	1:A:65:ALA:HB3	1:A:71:SER:HB2	4	0.8
(1,1381)	1:A:65:ALA:HB1	1:A:71:SER:HB2	13	0.8
(1,1381)	1:A:65:ALA:HB2	1:A:71:SER:HB2	13	0.8
(1,1381)	1:A:65:ALA:HB3	1:A:71:SER:HB2	13	0.8
(1,1121)	1:A:46:ARG:HG2	1:A:139:PHE:HE1	4	0.8
(1,1088)	1:A:44:PRO:HG2	1:A:45:ASN:HB2	4	0.8
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD11	8	0.79
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD12	8	0.79
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD13	8	0.79
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG21	5	0.79
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG22	5	0.79
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG23	5	0.79
(1,747)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HB2	16	0.79
(1,706)	1:A:26:ILE:HG21	1:A:28:GLN:HG2	16	0.79
(1,706)	1:A:26:ILE:HG22	1:A:28:GLN:HG2	16	0.79
(1,706)	1:A:26:ILE:HG23	1:A:28:GLN:HG2	16	0.79
(1,600)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:174:TRP:HZ3	6	0.79
(1,518)	1:A:22:ARG:H	1:A:23:SER:HB2	13	0.79
(1,268)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:173:ALA:HB1	19	0.79
(1,268)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:173:ALA:HB2	19	0.79
(1,268)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:173:ALA:HB3	19	0.79
(1,255)	1:A:9:ARG:HE	1:A:130:GLU:HG2	10	0.79
(1,2257)	1:A:133:LEU:HB2	1:A:136:LEU:HB2	12	0.79
(1,195)	1:A:5:GLN:HA	1:A:5:GLN:HG2	3	0.79
(1,195)	1:A:5:GLN:HA	1:A:5:GLN:HG2	6	0.79
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HB2	1	0.79
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HB2	1	0.79
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HB2	1	0.79
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB2	6	0.79
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB2	6	0.79



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB2	6	0.79
(1,1430)	1:A:70:ALA:HA	1:A:89:TYR:HE1	10	0.79
(1,1318)	1:A:59:ARG:HB2	1:A:59:ARG:HD2	6	0.79
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:56:GLY:H	5	0.79
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	20	0.79
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	20	0.79
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	20	0.79
(1,1153)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HG2	1	0.79
(1,1104)	1:A:46:ARG:H	1:A:47:ILE:HG12	12	0.79
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:139:PHE:HE1	2	0.79
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:139:PHE:HE1	2	0.79
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:139:PHE:HE1	2	0.79
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:139:PHE:HE1	4	0.79
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:139:PHE:HE1	4	0.79
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:139:PHE:HE1	4	0.79
(1,841)	1:A:32:ALA:HA	1:A:36:GLU:HB2	18	0.78
(1,807)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HG21	6	0.78
(1,807)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HG22	6	0.78
(1,807)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HG23	6	0.78
(1,747)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HB2	11	0.78
(1,458)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:18:ALA:H	8	0.78
(1,2524)	1:A:165:ARG:HA	1:A:168:GLN:HB2	16	0.78
(1,2471)	1:A:160:SER:HB2	1:A:162:GLU:H	17	0.78
(1,2441)	1:A:155:GLU:HA	1:A:155:GLU:HG2	20	0.78
(1,2389)	1:A:147:GLY:HA2	1:A:148:PRO:HG2	2	0.78
(1,2383)	1:A:145:PRO:HB2	1:A:146:GLY:H	3	0.78
(1,2178)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:131:MET:HG2	2	0.78
(1,2178)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:131:MET:HG2	2	0.78
(1,2178)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:131:MET:HG2	2	0.78
(1,1684)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:90:GLU:HG2	6	0.78
(1,1429)	1:A:70:ALA:HA	1:A:89:TYR:HD1	10	0.78
(1,1318)	1:A:59:ARG:HB2	1:A:59:ARG:HD2	2	0.78
(1,1245)	1:A:53:GLU:HG2	1:A:54:PRO:HA	17	0.78
(1,1203)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:129:TRP:HZ3	3	0.78
(1,1092)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:ARG:HG2	4	0.78
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:139:PHE:HE1	13	0.78
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:139:PHE:HE1	13	0.78
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:139:PHE:HE1	13	0.78
(1,849)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:HB2	18	0.77
(1,849)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:HB2	18	0.77
(1,849)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:HB2	18	0.77
(1,603)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:114:HIS:HB2	8	0.77



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,603)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:114:HIS:HB2	8	0.77
(1,603)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:114:HIS:HB2	8	0.77
(1,269)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:174:TRP:HE1	6	0.77
(1,2442)	1:A:155:GLU:HB2	1:A:156:GLU:H	11	0.77
(1,2420)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:152:ASP:H	9	0.77
(1,2417)	1:A:151:GLU:HA	1:A:151:GLU:HG2	13	0.77
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	10	0.77
(1,1648)	1:A:87:TRP:HE1	1:A:89:TYR:HD1	10	0.77
(1,1594)	1:A:84:THR:HA	1:A:98:GLU:HB2	16	0.77
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD21	3	0.77
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD22	3	0.77
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD23	3	0.77
(1,1318)	1:A:59:ARG:HB2	1:A:59:ARG:HD2	13	0.77
(1,988)	1:A:38:TRP:HA	1:A:99:LEU:HD11	2	0.76
(1,988)	1:A:38:TRP:HA	1:A:99:LEU:HD12	2	0.76
(1,988)	1:A:38:TRP:HA	1:A:99:LEU:HD13	2	0.76
(1,928)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:38:TRP:HD1	11	0.76
(1,849)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:HB2	16	0.76
(1,849)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:HB2	16	0.76
(1,849)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:HB2	16	0.76
(1,805)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:137:GLY:HA2	18	0.76
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:169:GLU:HG2	2	0.76
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:169:GLU:HG2	2	0.76
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:169:GLU:HG2	2	0.76
(1,2532)	1:A:165:ARG:HG2	1:A:169:GLU:HG2	1	0.76
(1,241)	1:A:8:GLU:HG2	1:A:9:ARG:H	8	0.76
(1,2161)	1:A:126:GLY:HA2	1:A:174:TRP:HZ3	7	0.76
(1,2068)	1:A:121:MET:HG2	1:A:125:VAL:HG11	7	0.76
(1,2068)	1:A:121:MET:HG2	1:A:125:VAL:HG12	7	0.76
(1,2068)	1:A:121:MET:HG2	1:A:125:VAL:HG13	7	0.76
(1,2024)	1:A:118:SER:HB2	1:A:122:LEU:H	9	0.76
(1,1867)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:H	10	0.76
(1,1863)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:H	17	0.76
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:112:LEU:H	13	0.76
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:112:LEU:H	13	0.76
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:112:LEU:H	13	0.76
(1,1686)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HD2	9	0.76
(1,1530)	1:A:78:GLU:H	1:A:79:PRO:HB2	14	0.76
(1,1517)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HD2	1	0.76
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD21	18	0.76
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD22	18	0.76
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD23	18	0.76



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	18	0.76
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	18	0.76
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	18	0.76
(1,1206)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:52:ILE:HD11	14	0.76
(1,1206)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:52:ILE:HD12	14	0.76
(1,1206)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:52:ILE:HD13	14	0.76
(1,1202)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:129:TRP:HH2	9	0.76
(1,1152)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HB2	11	0.76
(1,1121)	1:A:46:ARG:HG2	1:A:139:PHE:HE1	18	0.76
(1,1118)	1:A:46:ARG:HD2	1:A:139:PHE:HZ	9	0.76
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD11	3	0.76
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD12	3	0.76
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD13	3	0.76
(1,796)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HB	3	0.75
(1,603)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:114:HIS:HB2	1	0.75
(1,603)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:114:HIS:HB2	1	0.75
(1,603)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:114:HIS:HB2	1	0.75
(1,333)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:181:GLY:HA2	8	0.75
(1,333)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:181:GLY:HA2	8	0.75
(1,333)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:181:GLY:HA2	8	0.75
(1,2636)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:178:VAL:H	5	0.75
(1,2636)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:178:VAL:H	8	0.75
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:169:GLU:HG2	4	0.75
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:169:GLU:HG2	4	0.75
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:169:GLU:HG2	4	0.75
(1,2507)	1:A:164:MET:H	1:A:164:MET:HG2	4	0.75
(1,2420)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:152:ASP:H	6	0.75
(1,2257)	1:A:133:LEU:HB2	1:A:136:LEU:HB2	5	0.75
(1,2257)	1:A:133:LEU:HB2	1:A:136:LEU:HB2	15	0.75
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HB2	8	0.75
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HB2	8	0.75
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HB2	8	0.75
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:112:LEU:H	20	0.75
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:112:LEU:H	20	0.75
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:112:LEU:H	20	0.75
(1,1712)	1:A:92:LYS:HB2	1:A:92:LYS:HD2	11	0.75
(1,1684)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:90:GLU:HG2	3	0.75
(1,1674)	1:A:89:TYR:HA	1:A:90:GLU:HB2	4	0.75
(1,1571)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:99:LEU:H	18	0.75
(1,1527)	1:A:77:CYS:HB2	1:A:83:LEU:HD11	18	0.75
(1,1527)	1:A:77:CYS:HB2	1:A:83:LEU:HD12	18	0.75
(1,1527)	1:A:77:CYS:HB2	1:A:83:LEU:HD13	18	0.75



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1507)	1:A:75:LEU:HD21	1:A:86:SER:HB2	16	0.75
(1,1507)	1:A:75:LEU:HD22	1:A:86:SER:HB2	16	0.75
(1,1507)	1:A:75:LEU:HD23	1:A:86:SER:HB2	16	0.75
(1,1214)	1:A:52:ILE:HA	1:A:53:GLU:HB2	5	0.75
(1,1030)	1:A:40:ALA:H	1:A:46:ARG:HD2	19	0.75
(1,1024)	1:A:39:SER:HB2	1:A:46:ARG:HD2	6	0.75
(1,849)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:HB2	20	0.74
(1,849)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:HB2	20	0.74
(1,849)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:HB2	20	0.74
(1,808)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:31:ASP:H	12	0.74
(1,518)	1:A:22:ARG:H	1:A:23:SER:HB2	15	0.74
(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG21	1	0.74
(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG22	1	0.74
(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG23	1	0.74
(1,2552)	1:A:166:ILE:HG12	1:A:167:SER:HA	6	0.74
(1,2442)	1:A:155:GLU:HB2	1:A:156:GLU:H	1	0.74
(1,2276)	1:A:135:PHE:HE1	1:A:138:MET:HE1	20	0.74
(1,2276)	1:A:135:PHE:HE1	1:A:138:MET:HE2	20	0.74
(1,2276)	1:A:135:PHE:HE1	1:A:138:MET:HE3	20	0.74
(1,2178)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:131:MET:HG2	19	0.74
(1,2178)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:131:MET:HG2	19	0.74
(1,2178)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:131:MET:HG2	19	0.74
(1,1835)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:H	10	0.74
(1,1571)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:99:LEU:H	7	0.74
(1,1214)	1:A:52:ILE:HA	1:A:53:GLU:HB2	1	0.74
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	5	0.74
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	5	0.74
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	5	0.74
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD11	10	0.74
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD12	10	0.74
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD13	10	0.74
(1,603)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:114:HIS:HB2	7	0.73
(1,603)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:114:HIS:HB2	7	0.73
(1,603)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:114:HIS:HB2	7	0.73
(1,603)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:114:HIS:HB2	17	0.73
(1,603)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:114:HIS:HB2	17	0.73
(1,603)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:114:HIS:HB2	17	0.73
(1,603)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:114:HIS:HB2	20	0.73
(1,603)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:114:HIS:HB2	20	0.73
(1,603)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:114:HIS:HB2	20	0.73
(1,431)	1:A:16:ILE:H	1:A:20:GLU:HB2	4	0.73
(1,384)	1:A:14:ARG:H	1:A:20:GLU:HB2	10	0.73



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,362)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:23:SER:HG	20	0.73
(1,2636)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:178:VAL:H	10	0.73
(1,2636)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:178:VAL:H	12	0.73
(1,2257)	1:A:133:LEU:HB2	1:A:136:LEU:HB2	9	0.73
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:130:GLU:HB2	12	0.73
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:130:GLU:HB2	12	0.73
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:130:GLU:HB2	12	0.73
(1,1320)	1:A:59:ARG:HG2	1:A:62:GLY:HA2	16	0.73
(1,1237)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:67:GLN:HB2	13	0.73
(1,1237)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:67:GLN:HB2	13	0.73
(1,1237)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:67:GLN:HB2	13	0.73
(1,1214)	1:A:52:ILE:HA	1:A:53:GLU:HB2	13	0.73
(1,1214)	1:A:52:ILE:HA	1:A:53:GLU:HB2	19	0.73
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE1	3	0.73
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD11	7	0.73
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD12	7	0.73
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD13	7	0.73
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD11	7	0.73
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD12	7	0.73
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD13	7	0.73
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD11	7	0.73
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD12	7	0.73
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD13	7	0.73
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD11	18	0.72
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD12	18	0.72
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD13	18	0.72
(1,866)	1:A:33:PRO:HG2	1:A:34:VAL:H	4	0.72
(1,774)	1:A:29:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HB2	3	0.72
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD21	18	0.72
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD22	18	0.72
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD23	18	0.72
(1,603)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:114:HIS:HB2	10	0.72
(1,603)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:114:HIS:HB2	10	0.72
(1,603)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:114:HIS:HB2	10	0.72
(1,456)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:95:SER:HB2	8	0.72
(1,456)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:95:SER:HB2	8	0.72
(1,456)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:95:SER:HB2	8	0.72
(1,2636)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:178:VAL:H	20	0.72
(1,2442)	1:A:155:GLU:HB2	1:A:156:GLU:H	3	0.72
(1,2421)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:H	15	0.72
(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD11	13	0.72
(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD12	13	0.72



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD13	13	0.72
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:105:GLY:H	15	0.72
(1,1836)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:HB2	12	0.72
(1,1681)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:HG2	20	0.72
(1,1467)	1:A:74:ILE:H	1:A:74:ILE:HG12	10	0.72
(1,1467)	1:A:74:ILE:H	1:A:74:ILE:HG12	20	0.72
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	5	0.72
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	5	0.72
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	5	0.72
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD21	3	0.72
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD22	3	0.72
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD23	3	0.72
(1,1153)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HG2	11	0.72
(1,1024)	1:A:39:SER:HB2	1:A:46:ARG:HD2	20	0.72
(1,771)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:104:GLU:HG2	18	0.71
(1,407)	1:A:14:ARG:HD2	1:A:15:THR:H	9	0.71
(1,383)	1:A:13:ARG:HG2	1:A:14:ARG:HA	8	0.71
(1,383)	1:A:13:ARG:HG2	1:A:14:ARG:HA	12	0.71
(1,2636)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:178:VAL:H	11	0.71
(1,2636)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:178:VAL:H	16	0.71
(1,2531)	1:A:165:ARG:HG2	1:A:166:ILE:H	16	0.71
(1,2526)	1:A:165:ARG:HA	1:A:168:GLN:HG2	10	0.71
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB1	2	0.71
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB2	2	0.71
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB3	2	0.71
(1,2359)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:141:ARG:HD2	4	0.71
(1,1999)	1:A:116:THR:HG21	1:A:121:MET:HB2	16	0.71
(1,1999)	1:A:116:THR:HG22	1:A:121:MET:HB2	16	0.71
(1,1999)	1:A:116:THR:HG23	1:A:121:MET:HB2	16	0.71
(1,1610)	1:A:85:ILE:H	1:A:98:GLU:HB2	3	0.71
(1,1530)	1:A:78:GLU:H	1:A:79:PRO:HB2	8	0.71
(1,1381)	1:A:65:ALA:HB1	1:A:71:SER:HB2	8	0.71
(1,1381)	1:A:65:ALA:HB2	1:A:71:SER:HB2	8	0.71
(1,1381)	1:A:65:ALA:HB3	1:A:71:SER:HB2	8	0.71
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:68:GLY:HA2	4	0.71
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:68:GLY:HA2	4	0.71
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:68:GLY:HA2	4	0.71
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	19	0.71
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	19	0.71
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	19	0.71
(1,1119)	1:A:46:ARG:HD2	1:A:139:PHE:HE1	2	0.71
(1,1113)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HZ	12	0.71



Continued from previous page...

(1,1072)       1:A:43:ASP:HB2       1:A:46:ARG:HG2       17       0.7         (1,841)       1:A:32:ALA:HA       1:A:36:GLU:HB2       15       0.         (1,809)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG11       4       0.         (1,809)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG12       4       0.         (1,809)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG13       4       0.         (1,272)       1:A:9:ARG:HG2       1:A:174:TRP:HH2       16       0.         (1,2635)       1:A:174:TRP:HB2       1:A:177:LEU:H       20       0.         (1,2257)       1:A:133:LEU:HB2       1:A:136:LEU:HB2       20       0.         (1,2177)       1:A:127:VAL:HG11       1:A:130:GLU:HB2       15       0.         (1,2177)       1:A:127:VAL:HG12       1:A:130:GLU:HB2       15       0.         (1,2177)       1:A:127:VAL:HG13       1:A:130:GLU:HB2       15       0.         (1,1836)       1:A:102:SER:HB2       1:A:109:LEU:HB2       3       0.         (1,1786)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:111:GLU:H       15       0.         (1,1786)       1:A:99:LEU:HD12       1:A:111:GLU:H       15       0.	7 7 7 7 7 7
(1,809)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG11       4       0.         (1,809)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG12       4       0.         (1,809)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG13       4       0.         (1,272)       1:A:9:ARG:HG2       1:A:174:TRP:HH2       16       0.         (1,2635)       1:A:174:TRP:HB2       1:A:177:LEU:H       20       0.         (1,2257)       1:A:133:LEU:HB2       1:A:136:LEU:HB2       20       0.         (1,2177)       1:A:127:VAL:HG11       1:A:130:GLU:HB2       15       0.         (1,2177)       1:A:127:VAL:HG12       1:A:130:GLU:HB2       15       0.         (1,2177)       1:A:127:VAL:HG13       1:A:130:GLU:HB2       15       0.         (1,1836)       1:A:102:SER:HB2       1:A:109:LEU:HB2       3       0.         (1,1786)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:111:GLU:H       15       0.	7 7 7 7 7 7
(1,809)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG12       4       0.         (1,809)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG13       4       0.         (1,272)       1:A:9:ARG:HG2       1:A:174:TRP:HH2       16       0.         (1,2635)       1:A:174:TRP:HB2       1:A:177:LEU:H       20       0.         (1,2257)       1:A:133:LEU:HB2       1:A:136:LEU:HB2       20       0.         (1,2177)       1:A:127:VAL:HG11       1:A:130:GLU:HB2       15       0.         (1,2177)       1:A:127:VAL:HG12       1:A:130:GLU:HB2       15       0.         (1,2177)       1:A:127:VAL:HG13       1:A:130:GLU:HB2       15       0.         (1,1836)       1:A:102:SER:HB2       1:A:109:LEU:HB2       3       0.         (1,1786)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:111:GLU:H       15       0.	7 7 7 7
(1,809)       1:A:30:TYR:HD1       1:A:37:VAL:HG13       4       0.         (1,272)       1:A:9:ARG:HG2       1:A:174:TRP:HH2       16       0.         (1,2635)       1:A:174:TRP:HB2       1:A:177:LEU:H       20       0.         (1,2257)       1:A:133:LEU:HB2       1:A:136:LEU:HB2       20       0.         (1,2177)       1:A:127:VAL:HG11       1:A:130:GLU:HB2       15       0.         (1,2177)       1:A:127:VAL:HG12       1:A:130:GLU:HB2       15       0.         (1,2177)       1:A:127:VAL:HG13       1:A:130:GLU:HB2       15       0.         (1,1836)       1:A:102:SER:HB2       1:A:109:LEU:HB2       3       0.         (1,1786)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:111:GLU:H       15       0.	7 7 7 7
(1,272)       1:A:9:ARG:HG2       1:A:174:TRP:HH2       16       0.         (1,2635)       1:A:174:TRP:HB2       1:A:177:LEU:H       20       0.         (1,2257)       1:A:133:LEU:HB2       1:A:136:LEU:HB2       20       0.         (1,2177)       1:A:127:VAL:HG11       1:A:130:GLU:HB2       15       0.         (1,2177)       1:A:127:VAL:HG12       1:A:130:GLU:HB2       15       0.         (1,2177)       1:A:127:VAL:HG13       1:A:130:GLU:HB2       15       0.         (1,1836)       1:A:102:SER:HB2       1:A:109:LEU:HB2       3       0.         (1,1786)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:111:GLU:H       15       0.	7 7 7
(1,2635)       1:A:174:TRP:HB2       1:A:177:LEU:H       20       0.         (1,2257)       1:A:133:LEU:HB2       1:A:136:LEU:HB2       20       0.         (1,2177)       1:A:127:VAL:HG11       1:A:130:GLU:HB2       15       0.         (1,2177)       1:A:127:VAL:HG12       1:A:130:GLU:HB2       15       0.         (1,2177)       1:A:127:VAL:HG13       1:A:130:GLU:HB2       15       0.         (1,1836)       1:A:102:SER:HB2       1:A:109:LEU:HB2       3       0.         (1,1786)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:111:GLU:H       15       0.	7
(1,2257)       1:A:133:LEU:HB2       1:A:136:LEU:HB2       20       0.         (1,2177)       1:A:127:VAL:HG11       1:A:130:GLU:HB2       15       0.         (1,2177)       1:A:127:VAL:HG12       1:A:130:GLU:HB2       15       0.         (1,2177)       1:A:127:VAL:HG13       1:A:130:GLU:HB2       15       0.         (1,1836)       1:A:102:SER:HB2       1:A:109:LEU:HB2       3       0.         (1,1786)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:111:GLU:H       15       0.	.7
(1,2177)       1:A:127:VAL:HG11       1:A:130:GLU:HB2       15       0.         (1,2177)       1:A:127:VAL:HG12       1:A:130:GLU:HB2       15       0.         (1,2177)       1:A:127:VAL:HG13       1:A:130:GLU:HB2       15       0.         (1,2177)       1:A:127:VAL:HG13       1:A:130:GLU:HB2       15       0.         (1,1836)       1:A:102:SER:HB2       1:A:109:LEU:HB2       3       0.         (1,1786)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:111:GLU:H       15       0.	
(1,2177)       1:A:127:VAL:HG12       1:A:130:GLU:HB2       15       0.         (1,2177)       1:A:127:VAL:HG13       1:A:130:GLU:HB2       15       0.         (1,1836)       1:A:102:SER:HB2       1:A:109:LEU:HB2       3       0.         (1,1786)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:111:GLU:H       15       0.	
(1,2177)       1:A:127:VAL:HG13       1:A:130:GLU:HB2       15       0.         (1,1836)       1:A:102:SER:HB2       1:A:109:LEU:HB2       3       0.         (1,1786)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:111:GLU:H       15       0.	.7
(1,1836)       1:A:102:SER:HB2       1:A:109:LEU:HB2       3       0.         (1,1786)       1:A:99:LEU:HD11       1:A:111:GLU:H       15       0.	.7
(1,1786) 1:A:99:LEU:HD11 1:A:111:GLU:H 15 0.	.7
	.7
(1.1786) 1·A·99·LEU·HD12 1·A·111·GLU·H 15 0	.7
(1,1,00)   1,11,00,1110,111   1,11,1111,0110,111   10   0,	.7
(1,1786) 1:A:99:LEU:HD13 1:A:111:GLU:H 15 0.	.7
(1,1571) 1:A:82:ARG:HG2 1:A:99:LEU:H 10 0.	.7
(1,1286) 1:A:56:GLY:HA2 1:A:64:PHE:HB2 15 0.	.7
(1,1205) 1:A:51:PHE:HE1 1:A:52:ILE:H 2 0.	.7
(1,1056) 1:A:41:CYS:HB2 1:A:42:THR:HG21 8 0.	.7
(1,1056) 1:A:41:CYS:HB2 1:A:42:THR:HG22 8 0.	.7
(1,1056) 1:A:41:CYS:HB2 1:A:42:THR:HG23 8 0.	.7
(1,1001) 1:A:38:TRP:HE1 1:A:79:PRO:HG2 11 0.	.7
(1,820) 1:A:30:TYR:HE1 1:A:37:VAL:HG11 19 0.6	69
(1,820) 1:A:30:TYR:HE1 1:A:37:VAL:HG12 19 0.6	69
(1,820) 1:A:30:TYR:HE1 1:A:37:VAL:HG13 19 0.6	69
(1,817) 1:A:30:TYR:HE1 1:A:136:LEU:HD21 1 0.6	69
(1,817) 1:A:30:TYR:HE1 1:A:136:LEU:HD22 1 0.6	69
(1,817) 1:A:30:TYR:HE1 1:A:136:LEU:HD23 1 0.6	69
(1,706) 1:A:26:ILE:HG21 1:A:28:GLN:HG2 7 0.6	69
(1,706) 1:A:26:ILE:HG22 1:A:28:GLN:HG2 7 0.6	69
(1,706) 1:A:26:ILE:HG23 1:A:28:GLN:HG2 7 0.6	69
(1,496) 1:A:20:GLU:HG2 1:A:21:ALA:H 11 0.6	69
(1,494) 1:A:20:GLU:H 1:A:20:GLU:HG2 11 0.6	69
(1,431) 1:A:16:ILE:H 1:A:20:GLU:HB2 11 0.6	69
(1,388) 1:A:14:ARG:H 1:A:22:ARG:HG2 2 0.6	69
(1,2360) 1:A:141:ARG:HB2 1:A:143:ASP:H 17 0.6	69
(1,2352) 1:A:141:ARG:H 1:A:141:ARG:HD2 11 0.6	69
(1,1835) 1:A:102:SER:HB2 1:A:109:LEU:H 6 0.6	69
(1,1467) 1:A:74:ILE:H 1:A:74:ILE:HG12 11 0.6	69
(1,1467) 1:A:74:ILE:H 1:A:74:ILE:HG12 18 0.6	69
(1,1365) 1:A:64:PHE:HE1 1:A:66:LEU:HD11 7 0.6	69
(1,1365) 1:A:64:PHE:HE1 1:A:66:LEU:HD12 7 0.6	69



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1365)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	7	0.69
(1,1345)	1:A:63:ASN:HA	1:A:74:ILE:HG12	2	0.69
(1,1271)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:65:ALA:H	2	0.69
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE1	10	0.69
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG2	20	0.68
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG21	18	0.68
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG22	18	0.68
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG23	18	0.68
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG11	10	0.68
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG12	10	0.68
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG13	10	0.68
(1,776)	1:A:29:ARG:HG2	1:A:30:TYR:H	18	0.68
(1,749)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HD1	9	0.68
(1,458)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:18:ALA:H	2	0.68
(1,272)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:174:TRP:HH2	7	0.68
(1,270)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:174:TRP:HA	18	0.68
(1,2591)	1:A:171:GLY:H	1:A:172:GLU:HG2	3	0.68
(1,2552)	1:A:166:ILE:HG12	1:A:167:SER:HA	16	0.68
(1,2530)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:168:GLN:HG2	11	0.68
(1,241)	1:A:8:GLU:HG2	1:A:9:ARG:H	5	0.68
(1,2161)	1:A:126:GLY:HA2	1:A:174:TRP:HZ3	14	0.68
(1,194)	1:A:5:GLN:H	1:A:5:GLN:HG2	14	0.68
(1,1836)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:HB2	4	0.68
(1,1452)	1:A:71:SER:HB2	1:A:88:VAL:HB	18	0.68
(1,1246)	1:A:53:GLU:HG2	1:A:54:PRO:HD2	9	0.68
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:68:GLY:HA2	15	0.68
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:68:GLY:HA2	15	0.68
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:68:GLY:HA2	15	0.68
(1,1205)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:52:ILE:H	1	0.68
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE1	14	0.68
(1,747)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HB2	7	0.67
(1,431)	1:A:16:ILE:H	1:A:20:GLU:HB2	19	0.67
(1,2547)	1:A:166:ILE:HB	1:A:169:GLU:HG2	9	0.67
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB1	6	0.67
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB2	6	0.67
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB3	6	0.67
(1,2337)	1:A:139:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HD11	18	0.67
(1,2337)	1:A:139:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HD12	18	0.67
(1,2337)	1:A:139:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HD13	18	0.67
(1,2337)	1:A:139:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HD11	18	0.67
(1,2337)	1:A:139:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HD12	18	0.67
(1,2337)	1:A:139:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HD13	18	0.67



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2302)	1:A:138:MET:HA	1:A:141:ARG:HB2	5	0.67
(1,1518)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:84:THR:H	17	0.67
(1,1467)	1:A:74:ILE:H	1:A:74:ILE:HG12	15	0.67
(1,1286)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HB2	14	0.67
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:68:GLY:HA2	2	0.67
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:68:GLY:HA2	2	0.67
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:68:GLY:HA2	2	0.67
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:139:PHE:HE1	3	0.67
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:139:PHE:HE1	3	0.67
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:139:PHE:HE1	3	0.67
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:139:PHE:HE1	8	0.67
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:139:PHE:HE1	8	0.67
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:139:PHE:HE1	8	0.67
(1,895)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:HB2	5	0.66
(1,895)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:HB2	5	0.66
(1,895)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:HB2	5	0.66
(1,384)	1:A:14:ARG:H	1:A:20:GLU:HB2	15	0.66
(1,272)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:174:TRP:HH2	11	0.66
(1,2024)	1:A:118:SER:HB2	1:A:122:LEU:H	1	0.66
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	13	0.66
(1,1678)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:H	11	0.66
(1,1669)	1:A:88:VAL:HG21	1:A:94:ASP:HB2	5	0.66
(1,1669)	1:A:88:VAL:HG22	1:A:94:ASP:HB2	5	0.66
(1,1669)	1:A:88:VAL:HG23	1:A:94:ASP:HB2	5	0.66
(1,1530)	1:A:78:GLU:H	1:A:79:PRO:HB2	11	0.66
(1,1518)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:84:THR:H	4	0.66
(1,1467)	1:A:74:ILE:H	1:A:74:ILE:HG12	9	0.66
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:56:GLY:H	10	0.66
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD11	3	0.66
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD12	3	0.66
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD13	3	0.66
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD11	3	0.66
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD12	3	0.66
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD13	3	0.66
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD11	3	0.66
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD12	3	0.66
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD13	3	0.66
(1,806)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HD11	1	0.65
(1,806)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HD12	1	0.65
(1,806)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HD13	1	0.65
(1,767)	1:A:29:ARG:HE	1:A:104:GLU:HG2	14	0.65
(1,766)	1:A:29:ARG:HE	1:A:104:GLU:HB2	9	0.65



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2552)	1:A:166:ILE:HG12	1:A:167:SER:HA	18	0.65
(1,2526)	1:A:165:ARG:HA	1:A:168:GLN:HG2	19	0.65
(1,2421)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:H	5	0.65
(1,2418)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:H	4	0.65
(1,2181)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:170:ARG:HB2	4	0.65
(1,2181)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:170:ARG:HB2	4	0.65
(1,2181)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:170:ARG:HB2	4	0.65
(1,1202)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:129:TRP:HH2	10	0.65
(1,1114)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HE1	17	0.65
(1,928)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:38:TRP:HD1	12	0.64
(1,928)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:38:TRP:HD1	18	0.64
(1,776)	1:A:29:ARG:HG2	1:A:30:TYR:H	8	0.64
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD11	5	0.64
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD12	5	0.64
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD13	5	0.64
(1,458)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:18:ALA:H	4	0.64
(1,2636)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:178:VAL:H	14	0.64
(1,2635)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:177:LEU:H	6	0.64
(1,2387)	1:A:147:GLY:HA2	1:A:148:PRO:HD2	9	0.64
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HB2	20	0.64
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HB2	20	0.64
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HB2	20	0.64
(1,1649)	1:A:87:TRP:HE1	1:A:89:TYR:HE1	9	0.64
(1,1571)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:99:LEU:H	2	0.64
(1,1273)	1:A:55:LYS:HD2	1:A:56:GLY:H	11	0.64
(1,1202)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:129:TRP:HH2	20	0.64
(1,1001)	1:A:38:TRP:HE1	1:A:79:PRO:HG2	12	0.64
(1,813)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HB2	19	0.63
(1,600)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:174:TRP:HZ3	2	0.63
(1,384)	1:A:14:ARG:H	1:A:20:GLU:HB2	19	0.63
(1,269)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:174:TRP:HE1	10	0.63
(1,2635)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:177:LEU:H	3	0.63
(1,2635)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:177:LEU:H	11	0.63
(1,2552)	1:A:166:ILE:HG12	1:A:167:SER:HA	14	0.63
(1,2477)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HG2	13	0.63
(1,2024)	1:A:118:SER:HB2	1:A:122:LEU:H	2	0.63
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HB2	9	0.63
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HB2	9	0.63
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HB2	9	0.63
(1,1708)	1:A:92:LYS:HA	1:A:92:LYS:HD2	11	0.63
(1,1678)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:H	15	0.63
(1,1563)	1:A:82:ARG:HA	1:A:82:ARG:HD2	11	0.63



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1532)	1:A:78:GLU:H	1:A:81:ARG:HB2	16	0.63
(1,1388)	1:A:66:LEU:H	1:A:71:SER:HB2	8	0.63
(1,1273)	1:A:55:LYS:HD2	1:A:56:GLY:H	8	0.63
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:56:GLY:H	8	0.63
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:56:GLY:H	17	0.63
(1,1237)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:67:GLN:HB2	8	0.63
(1,1237)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:67:GLN:HB2	8	0.63
(1,1237)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:67:GLN:HB2	8	0.63
(1,1237)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:67:GLN:HB2	9	0.63
(1,1237)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:67:GLN:HB2	9	0.63
(1,1237)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:67:GLN:HB2	9	0.63
(1,1237)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:67:GLN:HB2	14	0.63
(1,1237)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:67:GLN:HB2	14	0.63
(1,1237)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:67:GLN:HB2	14	0.63
(1,1214)	1:A:52:ILE:HA	1:A:53:GLU:HB2	6	0.63
(1,1054)	1:A:41:CYS:H	1:A:99:LEU:HD11	5	0.63
(1,1054)	1:A:41:CYS:H	1:A:99:LEU:HD12	5	0.63
(1,1054)	1:A:41:CYS:H	1:A:99:LEU:HD13	5	0.63
(1,1018)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:39:SER:HB2	8	0.63
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD11	1	0.63
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD12	1	0.63
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD13	1	0.63
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD11	13	0.63
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD12	13	0.63
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD13	13	0.63
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD11	16	0.62
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD12	16	0.62
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD13	16	0.62
(1,776)	1:A:29:ARG:HG2	1:A:30:TYR:H	17	0.62
(1,750)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HE1	11	0.62
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD21	7	0.62
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD22	7	0.62
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD23	7	0.62
(1,431)	1:A:16:ILE:H	1:A:20:GLU:HB2	16	0.62
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD11	1	0.62
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD12	1	0.62
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD13	1	0.62
(1,2636)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:178:VAL:H	6	0.62
(1,2330)	1:A:139:PHE:HB2	1:A:141:ARG:H	10	0.62
(1,219)	1:A:7:THR:HG21	1:A:28:GLN:HG2	8	0.62
(1,219)	1:A:7:THR:HG22	1:A:28:GLN:HG2	8	0.62
(1,219)	1:A:7:THR:HG23	1:A:28:GLN:HG2	8	0.62



Continued from previous page...

Key		${f Atom-2}$	Model	Violation (Å)
(1,2038)	Atom-1 1:A:119:GLU:HB2	1:A:120:GLN:H	2	0.62
(1,2000) $(1,200)$	1:A:5:GLN:HG2	1:A:6:ALA:H	3	0.62
(1,1860)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:107:GLY:H	5	0.62
(1,1860) $(1,1860)$	1:A:104:GLU:HB2	1:A:107:GLY:H	17	0.62
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	1	0.62
(1,1569)	1:A:82:ARG:HD2	1:A:100:ARG:HB2	16	0.62
(1,1513)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HD2	20	0.62
(1,1419)	1:A:69:ASN:HA	1:A:89:TYR:HD1	10	0.62
(1,1299)	1:A:58:LEU:H	1:A:59:ARG:HG2	5	0.62
(1,1150)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:H	19	0.62
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG2	15	0.61
(1,819)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:140:ILE:HD11	12	0.61
(1,819)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:140:ILE:HD12	12	0.61
(1,819)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:140:ILE:HD13	12	0.61
(1,816)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:133:LEU:HD11	5	0.61
(1,816)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:133:LEU:HD12	5	0.61
(1,816)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:133:LEU:HD13	5	0.61
(1,458)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:18:ALA:H	5	0.61
(1,431)	1:A:16:ILE:H	1:A:20:GLU:HB2	12	0.61
(1,346)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:22:ARG:HG2	2	0.61
(1,346)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:22:ARG:HG2	2	0.61
(1,346)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:22:ARG:HG2	2	0.61
(1,269)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:174:TRP:HE1	13	0.61
(1,2635)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:177:LEU:H	17	0.61
(1,2591)	1:A:171:GLY:H	1:A:172:GLU:HG2	15	0.61
(1,2442)	1:A:155:GLU:HB2	1:A:156:GLU:H	12	0.61
(1,2442)	1:A:155:GLU:HB2	1:A:156:GLU:H	14	0.61
(1,2388)	1:A:147:GLY:HA2	1:A:148:PRO:HD3	2	0.61
(1,2161)	1:A:126:GLY:HA2	1:A:174:TRP:HZ3	6	0.61
(1,2139)	1:A:124:GLU:HG2	1:A:125:VAL:HA	18	0.61
(1,2024)	1:A:118:SER:HB2	1:A:122:LEU:H	5	0.61
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HB2	2	0.61
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HB2	2	0.61
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HB2	2	0.61
(1,1835)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:H	15	0.61
(1,1563)	1:A:82:ARG:HA	1:A:82:ARG:HD2	12	0.61
(1,1404)	1:A:67:GLN:H	1:A:67:GLN:HG2	14	0.61
(1,1299)	1:A:58:LEU:H	1:A:59:ARG:HG2	17	0.61
(1,1286)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HB2	10	0.61
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:68:GLY:HA2	7	0.61
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:68:GLY:HA2	7	0.61
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:68:GLY:HA2	7	0.61



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1202)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:129:TRP:HH2	19	0.61
(1,1030)	1:A:40:ALA:H	1:A:46:ARG:HD2	14	0.61
(1,796)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HB	5	0.6
(1,774)	1:A:29:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HB2	7	0.6
(1,407)	1:A:14:ARG:HD2	1:A:15:THR:H	3	0.6
(1,405)	1:A:14:ARG:HB2	1:A:23:SER:HB2	9	0.6
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD11	13	0.6
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD12	13	0.6
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD13	13	0.6
(1,2635)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:177:LEU:H	10	0.6
(1,2477)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HG2	12	0.6
(1,2462)	1:A:158:GLU:HG2	1:A:159:PRO:HD2	7	0.6
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB1	1	0.6
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB2	1	0.6
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB3	1	0.6
(1,2418)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:H	16	0.6
(1,2389)	1:A:147:GLY:HA2	1:A:148:PRO:HG2	3	0.6
(1,2038)	1:A:119:GLU:HB2	1:A:120:GLN:H	8	0.6
(1,2024)	1:A:118:SER:HB2	1:A:122:LEU:H	17	0.6
(1,1786)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:111:GLU:H	1	0.6
(1,1786)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:111:GLU:H	1	0.6
(1,1786)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:111:GLU:H	1	0.6
(1,1786)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:111:GLU:H	11	0.6
(1,1786)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:111:GLU:H	11	0.6
(1,1786)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:111:GLU:H	11	0.6
(1,1678)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:H	12	0.6
(1,1571)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:99:LEU:H	13	0.6
(1,1451)	1:A:71:SER:HB2	1:A:72:GLY:H	6	0.6
(1,1381)	1:A:65:ALA:HB1	1:A:71:SER:HB2	19	0.6
(1,1381)	1:A:65:ALA:HB2	1:A:71:SER:HB2	19	0.6
(1,1381)	1:A:65:ALA:HB3	1:A:71:SER:HB2	19	0.6
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD11	4	0.6
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD12	4	0.6
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD13	4	0.6
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD11	4	0.6
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD12	4	0.6
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD13	4	0.6
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD11	4	0.6
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD12	4	0.6
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD13	4	0.6
(1,1024)	1:A:39:SER:HB2	1:A:46:ARG:HD2	13	0.6
	1.11.00.0E10.11D2	1.111.10.11110.3.1112.2	10	0.0



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1014)	1:A:38:TRP:HZ2	1:A:79:PRO:HG2	11	0.6
(1,1001)	1:A:38:TRP:HE1	1:A:79:PRO:HG2	14	0.6
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG21	12	0.59
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG22	12	0.59
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG23	12	0.59
(1,747)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HB2	17	0.59
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD11	2	0.59
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD12	2	0.59
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD13	2	0.59
(1,431)	1:A:16:ILE:H	1:A:20:GLU:HB2	13	0.59
(1,2635)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:177:LEU:H	8	0.59
(1,2635)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:177:LEU:H	12	0.59
(1,2552)	1:A:166:ILE:HG12	1:A:167:SER:HA	12	0.59
(1,2552)	1:A:166:ILE:HG12	1:A:167:SER:HA	20	0.59
(1,2257)	1:A:133:LEU:HB2	1:A:136:LEU:HB2	10	0.59
(1,2257)	1:A:133:LEU:HB2	1:A:136:LEU:HB2	16	0.59
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:130:GLU:HB2	3	0.59
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:130:GLU:HB2	3	0.59
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:130:GLU:HB2	3	0.59
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:112:LEU:H	11	0.59
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:112:LEU:H	11	0.59
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:112:LEU:H	11	0.59
(1,1678)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:H	3	0.59
(1,1452)	1:A:71:SER:HB2	1:A:88:VAL:HB	6	0.59
(1,1286)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HB2	6	0.59
(1,1272)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:65:ALA:HB1	2	0.59
(1,1272)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:65:ALA:HB2	2	0.59
(1,1272)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:65:ALA:HB3	2	0.59
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD11	10	0.59
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD12	10	0.59
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD13	10	0.59
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG2	13	0.58
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG2	18	0.58
(1,812)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HG	19	0.58
(1,767)	1:A:29:ARG:HE	1:A:104:GLU:HG2	1	0.58
(1,747)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HB2	14	0.58
(1,706)	1:A:26:ILE:HG21	1:A:28:GLN:HG2	8	0.58
(1,706)	1:A:26:ILE:HG22	1:A:28:GLN:HG2	8	0.58
(1,706)	1:A:26:ILE:HG23	1:A:28:GLN:HG2	8	0.58
(1,518)	1:A:22:ARG:H	1:A:23:SER:HB2	8	0.58
(1,407)	1:A:14:ARG:HD2	1:A:15:THR:H	7	0.58
(1,2635)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:177:LEU:H	2	0.58



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2635)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:177:LEU:H	13	0.58
(1,2563)	1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HE21	20	0.58
(1,2552)	1:A:166:ILE:HG12	1:A:167:SER:HA	4	0.58
(1,2410)	1:A:150:PRO:HB2	1:A:151:GLU:H	16	0.58
(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD11	4	0.58
(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD12	4	0.58
(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD13	4	0.58
(1,2257)	1:A:133:LEU:HB2	1:A:136:LEU:HB2	11	0.58
(1,2161)	1:A:126:GLY:HA2	1:A:174:TRP:HZ3	5	0.58
(1,2038)	1:A:119:GLU:HB2	1:A:120:GLN:H	1	0.58
(1,193)	1:A:5:GLN:H	1:A:5:GLN:HB2	16	0.58
(1,1861)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:108:THR:H	18	0.58
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:112:LEU:H	15	0.58
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:112:LEU:H	15	0.58
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:112:LEU:H	15	0.58
(1,1684)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:90:GLU:HG2	7	0.58
(1,1680)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:HD2	3	0.58
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD21	18	0.58
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD22	18	0.58
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD23	18	0.58
(1,1318)	1:A:59:ARG:HB2	1:A:59:ARG:HD2	10	0.58
(1,1286)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HB2	3	0.58
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE1	13	0.58
(1,1120)	1:A:46:ARG:HG2	1:A:139:PHE:HZ	2	0.58
(1,1113)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HZ	18	0.58
(1,1018)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:39:SER:HB2	2	0.58
(1,820)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:37:VAL:HG11	11	0.57
(1,820)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:37:VAL:HG12	11	0.57
(1,820)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:37:VAL:HG13	11	0.57
(1,748)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HD11	11	0.57
(1,748)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HD12	11	0.57
(1,748)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HD13	11	0.57
(1,551)	1:A:23:SER:HB3	1:A:113:GLU:HG2	2	0.57
(1,530)	1:A:22:ARG:HD2	1:A:23:SER:H	6	0.57
(1,431)	1:A:16:ILE:H	1:A:20:GLU:HB2	18	0.57
(1,383)	1:A:13:ARG:HG2	1:A:14:ARG:HA	1	0.57
(1,366)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HB2	9	0.57
(1,271)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:174:TRP:HE1	16	0.57
(1,268)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:173:ALA:HB1	17	0.57
(1,268)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:173:ALA:HB2	17	0.57
(1,268)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:173:ALA:HB3	17	0.57
(1,2635)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:177:LEU:H	1	0.57



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2591)	1:A:171:GLY:H	1:A:172:GLU:HG2	18	0.57
(1,2552)	1:A:166:ILE:HG12	1:A:167:SER:HA	8	0.57
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD11	6	0.57
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD12	6	0.57
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD13	6	0.57
(1,2477)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HG2	11	0.57
(1,2038)	1:A:119:GLU:HB2	1:A:120:GLN:H	13	0.57
(1,1790)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:113:GLU:H	9	0.57
(1,1790)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:113:GLU:H	9	0.57
(1,1790)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:113:GLU:H	9	0.57
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:112:LEU:H	12	0.57
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:112:LEU:H	12	0.57
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:112:LEU:H	12	0.57
(1,1709)	1:A:92:LYS:HA	1:A:92:LYS:HE2	9	0.57
(1,1648)	1:A:87:TRP:HE1	1:A:89:TYR:HD1	6	0.57
(1,1271)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:65:ALA:H	4	0.57
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD21	17	0.57
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD22	17	0.57
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD23	17	0.57
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	8	0.57
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	8	0.57
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	8	0.57
(1,1202)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:129:TRP:HH2	16	0.57
(1,808)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:31:ASP:H	18	0.56
(1,781)	1:A:30:TYR:HA	1:A:30:TYR:HD1	6	0.56
(1,776)	1:A:29:ARG:HG2	1:A:30:TYR:H	11	0.56
(1,600)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:174:TRP:HZ3	19	0.56
(1,458)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:18:ALA:H	19	0.56
(1,405)	1:A:14:ARG:HB2	1:A:23:SER:HB2	3	0.56
(1,2635)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:177:LEU:H	19	0.56
(1,2552)	1:A:166:ILE:HG12	1:A:167:SER:HA	15	0.56
(1,2529)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:166:ILE:H	11	0.56
(1,2350)	1:A:140:ILE:HG21	1:A:141:ARG:HG2	8	0.56
(1,2350)	1:A:140:ILE:HG22	1:A:141:ARG:HG2	8	0.56
(1,2350)	1:A:140:ILE:HG23	1:A:141:ARG:HG2	8	0.56
(1,2024)	1:A:118:SER:HB2	1:A:122:LEU:H	18	0.56
(1,1866)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD21	17	0.56
(1,1866)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD22	17	0.56
(1,1866)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD23	17	0.56
(1,1690)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:90:GLU:HB2	16	0.56
(1,1685)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:H	8	0.56
(1,1518)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:84:THR:H	8	0.56



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1420)	1:A:69:ASN:HA	1:A:89:TYR:HE1	7	0.56
(1,1349)	1:A:63:ASN:HB2	1:A:64:PHE:H	18	0.56
(1,1273)	1:A:55:LYS:HD2	1:A:56:GLY:H	12	0.56
(1,1246)	1:A:53:GLU:HG2	1:A:54:PRO:HD2	11	0.56
(1,1243)	1:A:53:GLU:H	1:A:54:PRO:HD2	19	0.56
(1,1152)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HB2	14	0.56
(1,1104)	1:A:46:ARG:H	1:A:47:ILE:HG12	13	0.56
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD11	20	0.55
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD12	20	0.55
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD13	20	0.55
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD21	15	0.55
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD22	15	0.55
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD23	15	0.55
(1,603)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:114:HIS:HB2	3	0.55
(1,603)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:114:HIS:HB2	3	0.55
(1,603)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:114:HIS:HB2	3	0.55
(1,407)	1:A:14:ARG:HD2	1:A:15:THR:H	20	0.55
(1,384)	1:A:14:ARG:H	1:A:20:GLU:HB2	11	0.55
(1,2635)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:177:LEU:H	4	0.55
(1,2635)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:177:LEU:H	16	0.55
(1,2552)	1:A:166:ILE:HG12	1:A:167:SER:HA	19	0.55
(1,2421)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:H	4	0.55
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:150:PRO:HD2	7	0.55
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:150:PRO:HD2	7	0.55
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:150:PRO:HD2	7	0.55
(1,219)	1:A:7:THR:HG21	1:A:28:GLN:HG2	4	0.55
(1,219)	1:A:7:THR:HG22	1:A:28:GLN:HG2	4	0.55
(1,219)	1:A:7:THR:HG23	1:A:28:GLN:HG2	4	0.55
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:130:GLU:HB2	17	0.55
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:130:GLU:HB2	17	0.55
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:130:GLU:HB2	17	0.55
(1,194)	1:A:5:GLN:H	1:A:5:GLN:HG2	3	0.55
(1,1718)	1:A:92:LYS:HG2	1:A:93:PRO:HD2	2	0.55
(1,1709)	1:A:92:LYS:HA	1:A:92:LYS:HE2	12	0.55
(1,1690)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:90:GLU:HB2	15	0.55
(1,1680)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:HD2	12	0.55
(1,1653)	1:A:87:TRP:HB2	1:A:95:SER:H	11	0.55
(1,1532)	1:A:78:GLU:H	1:A:81:ARG:HB2	19	0.55
(1,1530)	1:A:78:GLU:H	1:A:79:PRO:HB2	20	0.55
(1,1345)	1:A:63:ASN:HA	1:A:74:ILE:HG12	15	0.55
(1,1345)	1:A:63:ASN:HA	1:A:74:ILE:HG12	18	0.55
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:56:GLY:H	9	0.55



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1246)	1:A:53:GLU:HG2	1:A:54:PRO:HD2	2	0.55
(1,1166)	1:A:49:ARG:HD2	1:A:139:PHE:HE1	9	0.55
(1,1001)	1:A:38:TRP:HE1	1:A:79:PRO:HG2	2	0.55
(1,988)	1:A:38:TRP:HA	1:A:99:LEU:HD11	5	0.54
(1,988)	1:A:38:TRP:HA	1:A:99:LEU:HD12	5	0.54
(1,988)	1:A:38:TRP:HA	1:A:99:LEU:HD13	5	0.54
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD11	15	0.54
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD12	15	0.54
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD13	15	0.54
(1,766)	1:A:29:ARG:HE	1:A:104:GLU:HB2	18	0.54
(1,706)	1:A:26:ILE:HG21	1:A:28:GLN:HG2	14	0.54
(1,706)	1:A:26:ILE:HG22	1:A:28:GLN:HG2	14	0.54
(1,706)	1:A:26:ILE:HG23	1:A:28:GLN:HG2	14	0.54
(1,638)	1:A:25:ILE:HG21	1:A:111:GLU:HB2	14	0.54
(1,638)	1:A:25:ILE:HG22	1:A:111:GLU:HB2	14	0.54
(1,638)	1:A:25:ILE:HG23	1:A:111:GLU:HB2	14	0.54
(1,518)	1:A:22:ARG:H	1:A:23:SER:HB2	4	0.54
(1,335)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:22:ARG:HD2	20	0.54
(1,335)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:22:ARG:HD2	20	0.54
(1,335)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:22:ARG:HD2	20	0.54
(1,2635)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:177:LEU:H	9	0.54
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:169:GLU:HG2	15	0.54
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:169:GLU:HG2	15	0.54
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:169:GLU:HG2	15	0.54
(1,2532)	1:A:165:ARG:HG2	1:A:169:GLU:HG2	11	0.54
(1,2529)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:166:ILE:H	6	0.54
(1,2492)	1:A:163:MET:H	1:A:164:MET:HG2	19	0.54
(1,2475)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HB2	15	0.54
(1,2456)	1:A:158:GLU:H	1:A:159:PRO:HD2	3	0.54
(1,2137)	1:A:124:GLU:HB2	1:A:125:VAL:H	18	0.54
(1,1836)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:HB2	1	0.54
(1,1835)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:H	8	0.54
(1,1678)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:H	17	0.54
(1,1451)	1:A:71:SER:HB2	1:A:72:GLY:H	18	0.54
(1,1237)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:67:GLN:HB2	18	0.54
(1,1237)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:67:GLN:HB2	18	0.54
(1,1237)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:67:GLN:HB2	18	0.54
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD11	7	0.54
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD12	7	0.54
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD13	7	0.54
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD11	8	0.54
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD12	8	0.54



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD13	8	0.54
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG21	14	0.53
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG22	14	0.53
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG23	14	0.53
(1,807)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HG21	20	0.53
(1,807)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HG22	20	0.53
(1,807)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HG23	20	0.53
(1,781)	1:A:30:TYR:HA	1:A:30:TYR:HD1	2	0.53
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD11	13	0.53
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD12	13	0.53
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD13	13	0.53
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD11	15	0.53
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD12	15	0.53
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD13	15	0.53
(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG21	3	0.53
(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG22	3	0.53
(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG23	3	0.53
(1,367)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HD2	5	0.53
(1,335)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:22:ARG:HD2	10	0.53
(1,335)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:22:ARG:HD2	10	0.53
(1,335)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:22:ARG:HD2	10	0.53
(1,270)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:174:TRP:HA	10	0.53
(1,268)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:173:ALA:HB1	13	0.53
(1,268)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:173:ALA:HB2	13	0.53
(1,268)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:173:ALA:HB3	13	0.53
(1,2636)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:178:VAL:H	7	0.53
(1,2591)	1:A:171:GLY:H	1:A:172:GLU:HG2	7	0.53
(1,2552)	1:A:166:ILE:HG12	1:A:167:SER:HA	1	0.53
(1,2547)	1:A:166:ILE:HB	1:A:169:GLU:HG2	12	0.53
(1,2547)	1:A:166:ILE:HB	1:A:169:GLU:HG2	17	0.53
(1,2532)	1:A:165:ARG:HG2	1:A:169:GLU:HG2	2	0.53
(1,2516)	1:A:164:MET:HE1	1:A:168:GLN:HE21	20	0.53
(1,2516)	1:A:164:MET:HE2	1:A:168:GLN:HE21	20	0.53
(1,2516)	1:A:164:MET:HE3	1:A:168:GLN:HE21	20	0.53
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB1	3	0.53
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB2	3	0.53
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB3	3	0.53
(1,2024)	1:A:118:SER:HB2	1:A:122:LEU:H	4	0.53
(1,1836)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:HB2	16	0.53
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:112:LEU:H	4	0.53
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:112:LEU:H	4	0.53
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:112:LEU:H	4	0.53



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1718)	1:A:92:LYS:HG2	1:A:93:PRO:HD2	8	0.53
(1,1687)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HE2	12	0.53
(1,1648)	1:A:87:TRP:HE1	1:A:89:TYR:HD1	3	0.53
(1,1056)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:42:THR:HG21	2	0.53
(1,1056)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:42:THR:HG22	2	0.53
(1,1056)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:42:THR:HG23	2	0.53
(1,1014)	1:A:38:TRP:HZ2	1:A:79:PRO:HG2	10	0.53
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD11	12	0.53
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD12	12	0.53
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD13	12	0.53
(1,939)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:37:VAL:H	13	0.52
(1,928)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:38:TRP:HD1	7	0.52
(1,603)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:114:HIS:HB2	15	0.52
(1,603)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:114:HIS:HB2	15	0.52
(1,603)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:114:HIS:HB2	15	0.52
(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG21	2	0.52
(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG22	2	0.52
(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG23	2	0.52
(1,366)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HB2	14	0.52
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD11	17	0.52
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD12	17	0.52
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD13	17	0.52
(1,271)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:174:TRP:HE1	7	0.52
(1,2635)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:177:LEU:H	18	0.52
(1,2571)	1:A:168:GLN:HB2	1:A:169:GLU:H	16	0.52
(1,2456)	1:A:158:GLU:H	1:A:159:PRO:HD2	19	0.52
(1,2383)	1:A:145:PRO:HB2	1:A:146:GLY:H	17	0.52
(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB1	13	0.52
(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB2	13	0.52
(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB3	13	0.52
(1,2038)	1:A:119:GLU:HB2	1:A:120:GLN:H	18	0.52
(1,1790)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:113:GLU:H	14	0.52
(1,1790)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:113:GLU:H	14	0.52
(1,1790)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:113:GLU:H	14	0.52
(1,1707)	1:A:92:LYS:H	1:A:92:LYS:HG2	1	0.52
(1,1693)	1:A:90:GLU:H	1:A:90:GLU:HB2	4	0.52
(1,1672)	1:A:89:TYR:HA	1:A:89:TYR:HD1	17	0.52
(1,1571)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:99:LEU:H	15	0.52
(1,1520)	1:A:76:ARG:HD2	1:A:77:CYS:H	20	0.52
(1,1518)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:84:THR:H	2	0.52
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD21	6	0.52
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD22	6	0.52



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD23	6	0.52
(1,1430)	1:A:70:ALA:HA	1:A:89:TYR:HE1	3	0.52
(1,1419)	1:A:69:ASN:HA	1:A:89:TYR:HD1	17	0.52
(1,1370)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:86:SER:H	18	0.52
(1,1285)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HA	13	0.52
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD21	20	0.52
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD22	20	0.52
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD23	20	0.52
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	16	0.52
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	16	0.52
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	16	0.52
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE1	20	0.52
(1,1151)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HA	11	0.52
(1,1113)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HZ	2	0.52
(1,1113)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HZ	6	0.52
(1,1109)	1:A:46:ARG:HA	1:A:49:ARG:HD2	2	0.52
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD11	16	0.52
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD12	16	0.52
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD13	16	0.52
(1,849)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:HB2	14	0.51
(1,849)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:HB2	14	0.51
(1,849)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:HB2	14	0.51
(1,808)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:31:ASP:H	15	0.51
(1,807)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HG21	2	0.51
(1,807)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HG22	2	0.51
(1,807)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HG23	2	0.51
(1,600)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:174:TRP:HZ3	12	0.51
(1,458)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:18:ALA:H	12	0.51
(1,458)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:18:ALA:H	17	0.51
(1,366)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HB2	2	0.51
(1,2563)	1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HE21	15	0.51
(1,2552)	1:A:166:ILE:HG12	1:A:167:SER:HA	17	0.51
(1,2547)	1:A:166:ILE:HB	1:A:169:GLU:HG2	3	0.51
(1,2529)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:166:ILE:H	19	0.51
(1,2516)	1:A:164:MET:HE1	1:A:168:GLN:HE21	5	0.51
(1,2516)	1:A:164:MET:HE2	1:A:168:GLN:HE21	5	0.51
(1,2516)	1:A:164:MET:HE3	1:A:168:GLN:HE21	5	0.51
(1,2477)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HG2	16	0.51
(1,2418)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:H	14	0.51
(1,2161)	1:A:126:GLY:HA2	1:A:174:TRP:HZ3	2	0.51
(1,2161)	1:A:126:GLY:HA2	1:A:174:TRP:HZ3	11	0.51
(1,2038)	1:A:119:GLU:HB2	1:A:120:GLN:H	15	0.51



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,193)	1:A:5:GLN:H	1:A:5:GLN:HB2	6	0.51
(1,1869)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:HD21	8	0.51
(1,1869)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:HD22	8	0.51
(1,1869)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:HD23	8	0.51
(1,1860)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:107:GLY:H	12	0.51
(1,1737)	1:A:96:GLU:HG2	1:A:97:VAL:H	7	0.51
(1,1718)	1:A:92:LYS:HG2	1:A:93:PRO:HD2	18	0.51
(1,1678)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:H	1	0.51
(1,1649)	1:A:87:TRP:HE1	1:A:89:TYR:HE1	19	0.51
(1,1622)	1:A:85:ILE:HG12	1:A:97:VAL:H	6	0.51
(1,1530)	1:A:78:GLU:H	1:A:79:PRO:HB2	10	0.51
(1,1527)	1:A:77:CYS:HB2	1:A:83:LEU:HD11	7	0.51
(1,1527)	1:A:77:CYS:HB2	1:A:83:LEU:HD12	7	0.51
(1,1527)	1:A:77:CYS:HB2	1:A:83:LEU:HD13	7	0.51
(1,1366)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:72:GLY:HA2	2	0.51
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:139:PHE:HE1	19	0.51
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:139:PHE:HE1	19	0.51
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:139:PHE:HE1	19	0.51
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD11	19	0.51
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD12	19	0.51
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD13	19	0.51
(1,1001)	1:A:38:TRP:HE1	1:A:79:PRO:HG2	15	0.51
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG2	11	0.5
(1,849)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:HB2	15	0.5
(1,849)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:HB2	15	0.5
(1,849)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:HB2	15	0.5
(1,820)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:37:VAL:HG11	13	0.5
(1,820)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:37:VAL:HG12	13	0.5
(1,820)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:37:VAL:HG13	13	0.5
(1,518)	1:A:22:ARG:H	1:A:23:SER:HB2	20	0.5
(1,456)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:95:SER:HB2	19	0.5
(1,456)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:95:SER:HB2	19	0.5
(1,456)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:95:SER:HB2	19	0.5
(1,431)	1:A:16:ILE:H	1:A:20:GLU:HB2	10	0.5
(1,2599)	1:A:172:GLU:HA	1:A:172:GLU:HG2	12	0.5
(1,2552)	1:A:166:ILE:HG12	1:A:167:SER:HA	9	0.5
(1,2532)	1:A:165:ARG:HG2	1:A:169:GLU:HG2	18	0.5
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB1	20	0.5
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB2	20	0.5
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB3	20	0.5
(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD11	3	0.5
(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD12	3	0.5



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD13	3	0.5
(1,2221)	1:A:130:GLU:HG2	1:A:174:TRP:HZ2	12	0.5
(1,2161)	1:A:126:GLY:HA2	1:A:174:TRP:HZ3	12	0.5
(1,2161)	1:A:126:GLY:HA2	1:A:174:TRP:HZ3	19	0.5
(1,2038)	1:A:119:GLU:HB2	1:A:120:GLN:H	10	0.5
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HB2	13	0.5
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HB2	13	0.5
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HB2	13	0.5
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	20	0.5
(1,1299)	1:A:58:LEU:H	1:A:59:ARG:HG2	9	0.5
(1,1271)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:65:ALA:H	15	0.5
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	12	0.5
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	12	0.5
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	12	0.5
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE1	11	0.5
(1,1153)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HG2	5	0.5
(1,1104)	1:A:46:ARG:H	1:A:47:ILE:HG12	3	0.5
(1,1104)	1:A:46:ARG:H	1:A:47:ILE:HG12	5	0.5
(1,1104)	1:A:46:ARG:H	1:A:47:ILE:HG12	7	0.5
(1,1072)	1:A:43:ASP:HB2	1:A:46:ARG:HG2	4	0.5
(1,1072)	1:A:43:ASP:HB2	1:A:46:ARG:HG2	14	0.5
(1,1047)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:46:ARG:HD2	1	0.5
(1,1047)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:46:ARG:HD2	1	0.5
(1,1047)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:46:ARG:HD2	1	0.5
(1,850)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:HG2	5	0.49
(1,850)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:HG2	5	0.49
(1,850)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:HG2	5	0.49
(1,820)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:37:VAL:HG11	4	0.49
(1,820)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:37:VAL:HG12	4	0.49
(1,820)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:37:VAL:HG13	4	0.49
(1,806)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HD11	14	0.49
(1,806)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HD12	14	0.49
(1,806)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HD13	14	0.49
(1,803)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HD11	19	0.49
(1,803)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HD12	19	0.49
(1,803)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HD13	19	0.49
(1,530)	1:A:22:ARG:HD2	1:A:23:SER:H	5	0.49
(1,530)	1:A:22:ARG:HD2	1:A:23:SER:H	12	0.49
(1,346)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:22:ARG:HG2	19	0.49
(1,346)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:22:ARG:HG2	19	0.49
(1,346)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:22:ARG:HG2	19	0.49
(1,270)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:174:TRP:HA	8	0.49



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2578)	1:A:169:GLU:HA	1:A:172:GLU:HG2	18	0.49
(1,2564)	1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HG2	18	0.49
(1,2552)	1:A:166:ILE:HG12	1:A:167:SER:HA	13	0.49
(1,2547)	1:A:166:ILE:HB	1:A:169:GLU:HG2	13	0.49
(1,2529)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:166:ILE:H	9	0.49
(1,2529)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:166:ILE:H	12	0.49
(1,2507)	1:A:164:MET:H	1:A:164:MET:HG2	19	0.49
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD11	18	0.49
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD12	18	0.49
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD13	18	0.49
(1,2337)	1:A:139:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HD11	10	0.49
(1,2337)	1:A:139:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HD12	10	0.49
(1,2337)	1:A:139:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HD13	10	0.49
(1,2337)	1:A:139:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HD11	10	0.49
(1,2337)	1:A:139:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HD12	10	0.49
(1,2337)	1:A:139:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HD13	10	0.49
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:130:GLU:HB2	13	0.49
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:130:GLU:HB2	13	0.49
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:130:GLU:HB2	13	0.49
(1,1715)	1:A:92:LYS:HE2	1:A:121:MET:HE1	7	0.49
(1,1715)	1:A:92:LYS:HE2	1:A:121:MET:HE2	7	0.49
(1,1715)	1:A:92:LYS:HE2	1:A:121:MET:HE3	7	0.49
(1,1571)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:99:LEU:H	3	0.49
(1,1381)	1:A:65:ALA:HB1	1:A:71:SER:HB2	17	0.49
(1,1381)	1:A:65:ALA:HB2	1:A:71:SER:HB2	17	0.49
(1,1381)	1:A:65:ALA:HB3	1:A:71:SER:HB2	17	0.49
(1,1306)	1:A:58:LEU:HB2	1:A:59:ARG:HG2	19	0.49
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:56:GLY:H	18	0.49
(1,1257)	1:A:55:LYS:H	1:A:55:LYS:HB2	15	0.49
(1,1113)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HZ	20	0.49
(1,1104)	1:A:46:ARG:H	1:A:47:ILE:HG12	4	0.49
(1,1056)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:42:THR:HG21	5	0.49
(1,1056)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:42:THR:HG22	5	0.49
(1,1056)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:42:THR:HG23	5	0.49
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:139:PHE:HE1	7	0.49
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:139:PHE:HE1	7	0.49
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:139:PHE:HE1	7	0.49
(1,1014)	1:A:38:TRP:HZ2	1:A:79:PRO:HG2	16	0.49
(1,895)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:HB2	6	0.48
(1,895)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:HB2	6	0.48
(1,895)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:HB2	6	0.48
(1,796)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:108:THR:HB	4	0.48



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

(1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD11         3         0.48           (1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD12         3         0.48           (1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD13         3         0.48           (1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD11         7         0.48           (1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD12         7         0.48           (1,631)         1:A:25:ILE:HD11         1:A:113:GLU:HB2         6         0.48           (1,631)         1:A:25:ILE:HD12         1:A:113:GLU:HB2         6         0.48           (1,631)         1:A:25:ILE:HD13         1:A:113:GLU:HB2         6         0.48           (1,631)         1:A:22:ILE:HG12         1:A:174:TRP:HZ3         15         0.48           (1,500)         1:A:22:ARG:HA         1:A:22:ARG:HG2         16         0.48           (1,520)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB2         17         0.48           (1,366)         1:A:174:TRP:HB2         1:A:177:LEU:H         7         0.48           (1,2635)         1:A:168:GLN:HB2         1:A:169:GLU:H         9         0.48           (1,2571)         1:A:168:GLN:HB2         1:A:169:	
(1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD13         3         0.48           (1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD11         7         0.48           (1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD12         7         0.48           (1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD13         7         0.48           (1,631)         1:A:25:ILE:HD11         1:A:13:GLU:HB2         6         0.48           (1,631)         1:A:25:ILE:HD12         1:A:113:GLU:HB2         6         0.48           (1,631)         1:A:25:ILE:HD13         1:A:113:GLU:HB2         6         0.48           (1,631)         1:A:25:ILE:HD13         1:A:113:GLU:HB2         6         0.48           (1,631)         1:A:25:ILE:HD13         1:A:113:GLU:HB2         6         0.48           (1,600)         1:A:24:ILE:HG12         1:A:174:TRP:HZ3         15         0.48           (1,520)         1:A:22:ARG:HA         1:A:22:ARG:HG2         16         0.48           (1,384)         1:A:14:ARG:H         1:A:20:GLU:HB2         17         0.48           (1,366)         1:A:174:TRP:HB2         1:A:177:LEU:H         7         0.48           (1,2635)         1:A:168:GLN:HB2         1:A:169:	
(1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD11         7         0.48           (1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD12         7         0.48           (1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD13         7         0.48           (1,631)         1:A:25:ILE:HD11         1:A:113:GLU:HB2         6         0.48           (1,631)         1:A:25:ILE:HD12         1:A:113:GLU:HB2         6         0.48           (1,631)         1:A:25:ILE:HD13         1:A:113:GLU:HB2         6         0.48           (1,631)         1:A:25:ILE:HD13         1:A:113:GLU:HB2         6         0.48           (1,600)         1:A:24:ILE:HG12         1:A:174:TRP:HB2         1         0.48           (1,520)         1:A:22:ARG:HA         1:A:22:ARG:HG2         16         0.48           (1,384)         1:A:14:ARG:H         1:A:20:GLU:HB2         17         0.48           (1,366)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB2         7         0.48           (1,2635)         1:A:174:TRP:HB2         1:A:177:LEU:H         7         0.48           (1,2571)         1:A:168:GLN:HB2         1:A:169:GLU:H         9         0.48           (1,2571)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:	
(1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD12         7         0.48           (1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD13         7         0.48           (1,631)         1:A:25:ILE:HD11         1:A:113:GLU:HB2         6         0.48           (1,631)         1:A:25:ILE:HD12         1:A:113:GLU:HB2         6         0.48           (1,631)         1:A:25:ILE:HD13         1:A:113:GLU:HB2         6         0.48           (1,631)         1:A:22:ILE:HG12         1:A:174:TRP:HZ3         15         0.48           (1,600)         1:A:24:ILE:HG12         1:A:174:TRP:HZ3         15         0.48           (1,520)         1:A:22:ARG:HA         1:A:22:ARG:HG2         16         0.48           (1,384)         1:A:14:ARG:H         1:A:20:GLU:HB2         17         0.48           (1,366)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB2         7         0.48           (1,2635)         1:A:174:TRP:HB2         1:A:177:LEU:H         7         0.48           (1,2571)         1:A:168:GLN:HB2         1:A:169:GLU:H         9         0.48           (1,2571)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:H         2         0.48           (1,2489)         1:A:162:GLU:HG2         1:A:166:ILE	
(1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD13         7         0.48           (1,631)         1:A:25:ILE:HD11         1:A:113:GLU:HB2         6         0.48           (1,631)         1:A:25:ILE:HD12         1:A:113:GLU:HB2         6         0.48           (1,631)         1:A:25:ILE:HD13         1:A:113:GLU:HB2         6         0.48           (1,600)         1:A:24:ILE:HG12         1:A:174:TRP:HZ3         15         0.48           (1,520)         1:A:22:ARG:HA         1:A:22:ARG:HG2         16         0.48           (1,384)         1:A:14:ARG:H         1:A:20:GLU:HB2         17         0.48           (1,366)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB2         7         0.48           (1,2635)         1:A:174:TRP:HB2         1:A:177:LEU:H         7         0.48           (1,2571)         1:A:168:GLN:HB2         1:A:169:GLU:H         9         0.48           (1,2571)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:169:GLU:H         12         0.48           (1,2489)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:HD11         14         0.48           (1,2489)         1:A:162:GLU:HG2         1:A:166:ILE:HD12         14         0.48           (1,2489)         1:A:162:GLU:HG2         1:A:1	
(1,631)         1:A:25:ILE:HD11         1:A:113:GLU:HB2         6         0.48           (1,631)         1:A:25:ILE:HD12         1:A:113:GLU:HB2         6         0.48           (1,631)         1:A:25:ILE:HD13         1:A:113:GLU:HB2         6         0.48           (1,600)         1:A:24:ILE:HG12         1:A:174:TRP:HZ3         15         0.48           (1,520)         1:A:22:ARG:HA         1:A:22:ARG:HG2         16         0.48           (1,384)         1:A:14:ARG:H         1:A:20:GLU:HB2         17         0.48           (1,366)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB2         7         0.48           (1,2635)         1:A:174:TRP:HB2         1:A:177:LEU:H         7         0.48           (1,2571)         1:A:168:GLN:HB2         1:A:169:GLU:H         9         0.48           (1,2571)         1:A:168:GLN:HB2         1:A:169:GLU:H         12         0.48           (1,2571)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:H         2         0.48           (1,2489)         1:A:165:GLU:HG2         1:A:166:ILE:HD11         14         0.48           (1,2489)         1:A:162:GLU:HG2         1:A:166:ILE:HD13         14         0.48           (1,2465)         1:A:159:PRO:HG2         1:A:16	
(1,631)         1:A:25:ILE:HD12         1:A:113:GLU:HB2         6         0.48           (1,631)         1:A:25:ILE:HD13         1:A:113:GLU:HB2         6         0.48           (1,600)         1:A:24:ILE:HG12         1:A:174:TRP:HZ3         15         0.48           (1,520)         1:A:22:ARG:HA         1:A:22:ARG:HG2         16         0.48           (1,384)         1:A:14:ARG:H         1:A:20:GLU:HB2         17         0.48           (1,366)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB2         7         0.48           (1,2635)         1:A:174:TRP:HB2         1:A:177:LEU:H         7         0.48           (1,2571)         1:A:168:GLN:HB2         1:A:169:GLU:H         9         0.48           (1,2571)         1:A:168:GLN:HB2         1:A:169:GLU:H         12         0.48           (1,2529)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:H         2         0.48           (1,2489)         1:A:162:GLU:HG2         1:A:166:ILE:HD11         14         0.48           (1,2489)         1:A:162:GLU:HG2         1:A:166:ILE:HD13         14         0.48           (1,2465)         1:A:159:PRO:HG2         1:A:160:SER:H         7         0.48           (1,2400)         1:A:149:VAL:HB         1:A:150:	
(1,631)         1:A:25:ILE:HD13         1:A:113:GLU:HB2         6         0.48           (1,600)         1:A:24:ILE:HG12         1:A:174:TRP:HZ3         15         0.48           (1,520)         1:A:22:ARG:HA         1:A:22:ARG:HG2         16         0.48           (1,384)         1:A:14:ARG:H         1:A:20:GLU:HB2         17         0.48           (1,366)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB2         7         0.48           (1,2635)         1:A:174:TRP:HB2         1:A:177:LEU:H         7         0.48           (1,2571)         1:A:168:GLN:HB2         1:A:169:GLU:H         9         0.48           (1,2571)         1:A:168:GLN:HB2         1:A:169:GLU:H         12         0.48           (1,2571)         1:A:168:GLN:HB2         1:A:166:ILE:H         2         0.48           (1,2529)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:H         2         0.48           (1,2489)         1:A:162:GLU:HG2         1:A:166:ILE:HD11         14         0.48           (1,2489)         1:A:162:GLU:HG2         1:A:166:ILE:HD13         14         0.48           (1,2465)         1:A:159:PRO:HG2         1:A:160:SER:H         7         0.48           (1,2400)         1:A:149:VAL:HB         1:A:150:P	
(1,600)       1:A:24:ILE:HG12       1:A:174:TRP:HZ3       15       0.48         (1,520)       1:A:22:ARG:HA       1:A:22:ARG:HG2       16       0.48         (1,384)       1:A:14:ARG:H       1:A:20:GLU:HB2       17       0.48         (1,366)       1:A:13:ARG:H       1:A:13:ARG:HB2       7       0.48         (1,2635)       1:A:174:TRP:HB2       1:A:177:LEU:H       7       0.48         (1,2571)       1:A:168:GLN:HB2       1:A:169:GLU:H       9       0.48         (1,2571)       1:A:168:GLN:HB2       1:A:169:GLU:H       12       0.48         (1,2529)       1:A:165:ARG:HB2       1:A:166:ILE:H       2       0.48         (1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD11       14       0.48         (1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD12       14       0.48         (1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD13       14       0.48         (1,2465)       1:A:159:PRO:HG2       1:A:160:SER:H       7       0.48         (1,2400)       1:A:149:VAL:HB       1:A:150:PRO:HD2       3       0.48	
(1,520)       1:A:22:ARG:HA       1:A:22:ARG:HG2       16       0.48         (1,384)       1:A:14:ARG:H       1:A:20:GLU:HB2       17       0.48         (1,366)       1:A:13:ARG:H       1:A:13:ARG:HB2       7       0.48         (1,2635)       1:A:174:TRP:HB2       1:A:177:LEU:H       7       0.48         (1,2571)       1:A:168:GLN:HB2       1:A:169:GLU:H       9       0.48         (1,2571)       1:A:168:GLN:HB2       1:A:169:GLU:H       12       0.48         (1,2529)       1:A:165:ARG:HB2       1:A:166:ILE:H       2       0.48         (1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD11       14       0.48         (1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD12       14       0.48         (1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD13       14       0.48         (1,2465)       1:A:159:PRO:HG2       1:A:160:SER:H       7       0.48         (1,2400)       1:A:149:VAL:HB       1:A:150:PRO:HD2       3       0.48	
(1,384)       1:A:14:ARG:H       1:A:20:GLU:HB2       17       0.48         (1,366)       1:A:13:ARG:H       1:A:13:ARG:HB2       7       0.48         (1,2635)       1:A:174:TRP:HB2       1:A:177:LEU:H       7       0.48         (1,2571)       1:A:168:GLN:HB2       1:A:169:GLU:H       9       0.48         (1,2571)       1:A:168:GLN:HB2       1:A:169:GLU:H       12       0.48         (1,2529)       1:A:165:ARG:HB2       1:A:166:ILE:H       2       0.48         (1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD11       14       0.48         (1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD12       14       0.48         (1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD13       14       0.48         (1,2465)       1:A:159:PRO:HG2       1:A:160:SER:H       7       0.48         (1,2400)       1:A:149:VAL:HB       1:A:150:PRO:HD2       3       0.48	
(1,366)       1:A:13:ARG:H       1:A:13:ARG:HB2       7       0.48         (1,2635)       1:A:174:TRP:HB2       1:A:177:LEU:H       7       0.48         (1,2571)       1:A:168:GLN:HB2       1:A:169:GLU:H       9       0.48         (1,2571)       1:A:168:GLN:HB2       1:A:169:GLU:H       12       0.48         (1,2529)       1:A:165:ARG:HB2       1:A:166:ILE:H       2       0.48         (1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD11       14       0.48         (1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD12       14       0.48         (1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD13       14       0.48         (1,2465)       1:A:159:PRO:HG2       1:A:160:SER:H       7       0.48         (1,2400)       1:A:149:VAL:HB       1:A:150:PRO:HD2       3       0.48	
(1,2635)       1:A:174:TRP:HB2       1:A:177:LEU:H       7       0.48         (1,2571)       1:A:168:GLN:HB2       1:A:169:GLU:H       9       0.48         (1,2571)       1:A:168:GLN:HB2       1:A:169:GLU:H       12       0.48         (1,2571)       1:A:165:ARG:HB2       1:A:166:ILE:H       2       0.48         (1,2529)       1:A:165:ARG:HB2       1:A:166:ILE:H       2       0.48         (1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD11       14       0.48         (1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD12       14       0.48         (1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD13       14       0.48         (1,2465)       1:A:159:PRO:HG2       1:A:160:SER:H       7       0.48         (1,2400)       1:A:149:VAL:HB       1:A:150:PRO:HD2       3       0.48	
(1,2571)       1:A:168:GLN:HB2       1:A:169:GLU:H       9       0.48         (1,2571)       1:A:168:GLN:HB2       1:A:169:GLU:H       12       0.48         (1,2529)       1:A:165:ARG:HB2       1:A:166:ILE:H       2       0.48         (1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD11       14       0.48         (1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD12       14       0.48         (1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD13       14       0.48         (1,2465)       1:A:159:PRO:HG2       1:A:160:SER:H       7       0.48         (1,2400)       1:A:149:VAL:HB       1:A:150:PRO:HD2       3       0.48	
(1,2571)       1:A:168:GLN:HB2       1:A:169:GLU:H       12       0.48         (1,2529)       1:A:165:ARG:HB2       1:A:166:ILE:H       2       0.48         (1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD11       14       0.48         (1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD12       14       0.48         (1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD13       14       0.48         (1,2489)       1:A:159:PRO:HG2       1:A:160:SER:H       7       0.48         (1,2465)       1:A:149:VAL:HB       1:A:150:PRO:HD2       3       0.48	
(1,2529)       1:A:165:ARG:HB2       1:A:166:ILE:H       2       0.48         (1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD11       14       0.48         (1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD12       14       0.48         (1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD13       14       0.48         (1,2465)       1:A:159:PRO:HG2       1:A:160:SER:H       7       0.48         (1,2400)       1:A:149:VAL:HB       1:A:150:PRO:HD2       3       0.48	
(1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD11       14       0.48         (1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD12       14       0.48         (1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD13       14       0.48         (1,2485)       1:A:159:PRO:HG2       1:A:160:SER:H       7       0.48         (1,2400)       1:A:149:VAL:HB       1:A:150:PRO:HD2       3       0.48	
(1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD12       14       0.48         (1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD13       14       0.48         (1,2465)       1:A:159:PRO:HG2       1:A:160:SER:H       7       0.48         (1,2400)       1:A:149:VAL:HB       1:A:150:PRO:HD2       3       0.48	
(1,2489)       1:A:162:GLU:HG2       1:A:166:ILE:HD13       14       0.48         (1,2465)       1:A:159:PRO:HG2       1:A:160:SER:H       7       0.48         (1,2400)       1:A:149:VAL:HB       1:A:150:PRO:HD2       3       0.48	
(1,2465)       1:A:159:PRO:HG2       1:A:160:SER:H       7       0.48         (1,2400)       1:A:149:VAL:HB       1:A:150:PRO:HD2       3       0.48	-
(1,2400) 1:A:149:VAL:HB 1:A:150:PRO:HD2 3 0.48	
(1,2381) 1:A:144:LEU:HD11 1:A:145:PRO:HD2 17 0.48	
(1,2381) 1:A:144:LEU:HD12 1:A:145:PRO:HD2 17 0.48	
(1,2381) 1:A:144:LEU:HD13 1:A:145:PRO:HD2 17 0.48	
(1,2350) 1:A:140:ILE:HG21 1:A:141:ARG:HG2 7 0.48	
(1,2350) 1:A:140:ILE:HG22 1:A:141:ARG:HG2 7 0.48	
(1,2350) 1:A:140:ILE:HG23 1:A:141:ARG:HG2 7 0.48	
(1,2038) 1:A:119:GLU:HB2 1:A:120:GLN:H 7 0.48	
(1,1866) 1:A:104:GLU:HB2 1:A:109:LEU:HD21 18 0.48	
(1,1866) 1:A:104:GLU:HB2 1:A:109:LEU:HD22 18 0.48	
(1,1866) 1:A:104:GLU:HB2 1:A:109:LEU:HD23 18 0.48	
(1,1860) 1:A:104:GLU:HB2 1:A:107:GLY:H 20 0.48	
(1,1851) 1:A:104:GLU:H 1:A:104:GLU:HB2 18 0.48	
(1,1690) 1:A:89:TYR:HE1 1:A:90:GLU:HB2 8 0.48	
(1,1451) 1:A:71:SER:HB2 1:A:72:GLY:H 4 0.48	
(1,1388) 1:A:66:LEU:H 1:A:71:SER:HB2 13 0.48	
(1,1285) 1:A:56:GLY:HA2 1:A:64:PHE:HA 5 0.48	
(1,1245) 1:A:53:GLU:HG2 1:A:54:PRO:HA 6 0.48	
(1,1119) 1:A:46:ARG:HD2 1:A:139:PHE:HE1 1 0.48	
(1,1104) 1:A:46:ARG:H 1:A:47:ILE:HG12 8 0.48	
(1,1018) 1:A:38:TRP:HB2 1:A:39:SER:HB2 13 0.48	



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG2	5	0.47
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG2	19	0.47
(1,849)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:HB2	9	0.47
(1,849)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:HB2	9	0.47
(1,849)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:HB2	9	0.47
(1,820)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:37:VAL:HG11	8	0.47
(1,820)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:37:VAL:HG12	8	0.47
(1,820)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:37:VAL:HG13	8	0.47
(1,748)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HD11	18	0.47
(1,748)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HD12	18	0.47
(1,748)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HD13	18	0.47
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD21	6	0.47
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD22	6	0.47
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD23	6	0.47
(1,458)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:18:ALA:H	10	0.47
(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG21	9	0.47
(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG22	9	0.47
(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG23	9	0.47
(1,366)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HB2	3	0.47
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD11	12	0.47
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD12	12	0.47
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD13	12	0.47
(1,2552)	1:A:166:ILE:HG12	1:A:167:SER:HA	10	0.47
(1,2480)	1:A:161:PRO:HG2	1:A:162:GLU:H	11	0.47
(1,2456)	1:A:158:GLU:H	1:A:159:PRO:HD2	7	0.47
(1,2392)	1:A:148:PRO:HD2	1:A:149:VAL:H	9	0.47
(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD11	7	0.47
(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD12	7	0.47
(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD13	7	0.47
(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD11	20	0.47
(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD12	20	0.47
(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD13	20	0.47
(1,2038)	1:A:119:GLU:HB2	1:A:120:GLN:H	14	0.47
(1,2038)	1:A:119:GLU:HB2	1:A:120:GLN:H	20	0.47
(1,2024)	1:A:118:SER:HB2	1:A:122:LEU:H	3	0.47
(1,2022)	1:A:118:SER:HB2	1:A:120:GLN:H	9	0.47
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HB2	5	0.47
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HB2	5	0.47
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HB2	5	0.47
(1,1869)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:HD21	10	0.47
(1,1869)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:HD22	10	0.47
(1,1869)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:HD23	10	0.47



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1678)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:H	4	0.47
(1,1451)	1:A:71:SER:HB2	1:A:72:GLY:H	8	0.47
(1,1451)	1:A:71:SER:HB2	1:A:72:GLY:H	15	0.47
(1,1299)	1:A:58:LEU:H	1:A:59:ARG:HG2	12	0.47
(1,1243)	1:A:53:GLU:H	1:A:54:PRO:HD2	9	0.47
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE1	2	0.47
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE1	12	0.47
(1,1151)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HA	19	0.47
(1,939)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:37:VAL:H	8	0.46
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD11	7	0.46
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD12	7	0.46
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD13	7	0.46
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD11	11	0.46
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD12	11	0.46
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD13	11	0.46
(1,895)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:HB2	19	0.46
(1,895)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:HB2	19	0.46
(1,895)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:HB2	19	0.46
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG2	1	0.46
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG2	9	0.46
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD11	10	0.46
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD12	10	0.46
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD13	10	0.46
(1,366)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HB2	15	0.46
(1,366)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HB2	16	0.46
(1,335)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:22:ARG:HD2	2	0.46
(1,335)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:22:ARG:HD2	2	0.46
(1,335)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:22:ARG:HD2	2	0.46
(1,2710)	1:A:180:SER:H	1:A:180:SER:HB2	14	0.46
(1,269)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:174:TRP:HE1	17	0.46
(1,2636)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:178:VAL:H	15	0.46
(1,2591)	1:A:171:GLY:H	1:A:172:GLU:HG2	6	0.46
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD11	16	0.46
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD12	16	0.46
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD13	16	0.46
(1,2480)	1:A:161:PRO:HG2	1:A:162:GLU:H	14	0.46
(1,2375)	1:A:144:LEU:H	1:A:145:PRO:HD2	5	0.46
(1,2364)	1:A:142:GLY:H	1:A:144:LEU:HB2	8	0.46
(1,2330)	1:A:139:PHE:HB2	1:A:141:ARG:H	1	0.46
(1,2312)	1:A:138:MET:HB2	1:A:144:LEU:HD11	5	0.46
(1,2312)	1:A:138:MET:HB2	1:A:144:LEU:HD12	5	0.46
(1,2312)	1:A:138:MET:HB2	1:A:144:LEU:HD13	5	0.46



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2038)	1:A:119:GLU:HB2	1:A:120:GLN:H	3	0.46
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HB2	3	0.46
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HB2	3	0.46
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HB2	3	0.46
(1,1913)	1:A:110:LEU:H	1:A:110:LEU:HB2	10	0.46
(1,1860)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:107:GLY:H	6	0.46
(1,1860)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:107:GLY:H	9	0.46
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:105:GLY:H	9	0.46
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	7	0.46
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	15	0.46
(1,1786)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:111:GLU:H	13	0.46
(1,1786)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:111:GLU:H	13	0.46
(1,1786)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:111:GLU:H	13	0.46
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HD21	1	0.46
	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HD22	1	0.46
	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HD23	1	0.46
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HD21	1	0.46
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HD22	1	0.46
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HD23	1	0.46
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HD21	1	0.46
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HD22	1	0.46
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HD23	1	0.46
(1,1714)	1:A:92:LYS:HD2	1:A:93:PRO:HD2	12	0.46
(1,1518)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:84:THR:H	19	0.46
(1,1246)	1:A:53:GLU:HG2	1:A:54:PRO:HD2	6	0.46
(1,1226)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:69:ASN:HD21	5	0.46
(1,1226)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:69:ASN:HD21	5	0.46
(1,1226)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:69:ASN:HD21	5	0.46
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD21	8	0.46
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD22	8	0.46
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD23	8	0.46
(1,1069)	1:A:43:ASP:HB2	1:A:45:ASN:H	13	0.46
(1,749)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HD1	7	0.45
(1,748)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HD11	8	0.45
(1,748)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HD12	8	0.45
(1,748)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HD13	8	0.45
(1,530)	1:A:22:ARG:HD2	1:A:23:SER:H	3	0.45
(1,390)	1:A:14:ARG:HA	1:A:14:ARG:HG2	18	0.45
(1,383)	1:A:13:ARG:HG2	1:A:14:ARG:HA	17	0.45
(1,362)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:23:SER:HG	4	0.45
(1,335)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:22:ARG:HD2	3	0.45
(1,335)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:22:ARG:HD2	3	0.45



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,335)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:22:ARG:HD2	3	0.45
(1,2635)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:177:LEU:H	5	0.45
(1,2480)	1:A:161:PRO:HG2	1:A:162:GLU:H	12	0.45
(1,2454)	1:A:158:GLU:H	1:A:158:GLU:HB2	14	0.45
(1,2421)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:H	13	0.45
(1,2418)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:H	1	0.45
(1,2380)	1:A:144:LEU:HB2	1:A:145:PRO:HD2	13	0.45
(1,2330)	1:A:139:PHE:HB2	1:A:141:ARG:H	3	0.45
(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB1	17	0.45
(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB2	17	0.45
(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB3	17	0.45
(1,2178)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:131:MET:HG2	12	0.45
(1,2178)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:131:MET:HG2	12	0.45
(1,2178)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:131:MET:HG2	12	0.45
(1,208)	1:A:7:THR:HA	1:A:28:GLN:HG2	11	0.45
(1,1530)	1:A:78:GLU:H	1:A:79:PRO:HB2	7	0.45
(1,1345)	1:A:63:ASN:HA	1:A:74:ILE:HG12	9	0.45
(1,1018)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:39:SER:HB2	17	0.45
(1,1014)	1:A:38:TRP:HZ2	1:A:79:PRO:HG2	5	0.45
(1,895)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:HB2	16	0.44
(1,895)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:HB2	16	0.44
(1,895)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:HB2	16	0.44
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG2	6	0.44
(1,750)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HE1	2	0.44
(1,603)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:114:HIS:HB2	11	0.44
(1,603)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:114:HIS:HB2	11	0.44
(1,603)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:114:HIS:HB2	11	0.44
(1,600)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:174:TRP:HZ3	11	0.44
(1,366)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HB2	13	0.44
(1,366)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HB2	19	0.44
(1,362)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:23:SER:HG	8	0.44
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD11	4	0.44
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD12	4	0.44
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD13	4	0.44
(1,2635)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:177:LEU:H	15	0.44
(1,2564)	1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HG2	11	0.44
(1,2552)	1:A:166:ILE:HG12	1:A:167:SER:HA	5	0.44
(1,2552)	1:A:166:ILE:HG12	1:A:167:SER:HA	11	0.44
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD11	15	0.44
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD12	15	0.44
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD13	15	0.44
(1,2392)	1:A:148:PRO:HD2	1:A:149:VAL:H	4	0.44



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2378)	1:A:144:LEU:HA	1:A:144:LEU:HD11	16	0.44
(1,2378)	1:A:144:LEU:HA	1:A:144:LEU:HD12	16	0.44
(1,2378)	1:A:144:LEU:HA	1:A:144:LEU:HD13	16	0.44
(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB1	4	0.44
(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB2	4	0.44
(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB3	4	0.44
(1,2038)	1:A:119:GLU:HB2	1:A:120:GLN:H	4	0.44
(1,2038)	1:A:119:GLU:HB2	1:A:120:GLN:H	9	0.44
(1,1999)	1:A:116:THR:HG21	1:A:121:MET:HB2	7	0.44
(1,1999)	1:A:116:THR:HG22	1:A:121:MET:HB2	7	0.44
(1,1999)	1:A:116:THR:HG23	1:A:121:MET:HB2	7	0.44
(1,1868)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:HB2	8	0.44
(1,1868)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:HB2	10	0.44
(1,1569)	1:A:82:ARG:HD2	1:A:100:ARG:HB2	10	0.44
(1,1452)	1:A:71:SER:HB2	1:A:88:VAL:HB	16	0.44
(1,1429)	1:A:70:ALA:HA	1:A:89:TYR:HD1	3	0.44
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD21	11	0.44
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD22	11	0.44
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD23	11	0.44
(1,1182)	1:A:50:TRP:HH2	1:A:136:LEU:HB2	20	0.44
(1,1151)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HA	9	0.44
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:139:PHE:HE1	17	0.44
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:139:PHE:HE1	17	0.44
(1,1041)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:139:PHE:HE1	17	0.44
(1,1018)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:39:SER:HB2	1	0.44
(1,895)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:HB2	9	0.43
(1,895)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:HB2	9	0.43
(1,895)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:HB2	9	0.43
(1,765)	1:A:29:ARG:HA	1:A:30:TYR:HD1	19	0.43
(1,459)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:19:GLY:H	6	0.43
(1,458)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:18:ALA:H	9	0.43
(1,390)	1:A:14:ARG:HA	1:A:14:ARG:HG2	3	0.43
(1,390)	1:A:14:ARG:HA	1:A:14:ARG:HG2	12	0.43
(1,2635)	1:A:174:TRP:HB2	1:A:177:LEU:H	14	0.43
(1,2571)	1:A:168:GLN:HB2	1:A:169:GLU:H	6	0.43
(1,2550)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:170:ARG:HG2	4	0.43
(1,2550)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:170:ARG:HG2	4	0.43
(1,2550)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:170:ARG:HG2	4	0.43
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:169:GLU:HG2	1	0.43
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:169:GLU:HG2	1	0.43
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:169:GLU:HG2	1	0.43
(1,2442)	1:A:155:GLU:HB2	1:A:156:GLU:H	18	0.43



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2424)	1:A:152:ASP:H	1:A:153:ALA:H	15	0.43
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB1	5	0.43
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB2	5	0.43
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB3	5	0.43
(1,240)	1:A:8:GLU:HG2	1:A:27:ARG:HB2	13	0.43
(1,2375)	1:A:144:LEU:H	1:A:145:PRO:HD2	3	0.43
(1,2375)	1:A:144:LEU:H	1:A:145:PRO:HD2	6	0.43
(1,2180)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:167:SER:HB2	20	0.43
(1,2180)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:167:SER:HB2	20	0.43
(1,2180)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:167:SER:HB2	20	0.43
(1,1835)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:H	1	0.43
(1,1798)	1:A:100:ARG:HG2	1:A:101:LEU:H	18	0.43
(1,1621)	1:A:85:ILE:HD11	1:A:99:LEU:HB2	10	0.43
(1,1621)	1:A:85:ILE:HD12	1:A:99:LEU:HB2	10	0.43
(1,1621)	1:A:85:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HB2	10	0.43
(1,1451)	1:A:71:SER:HB2	1:A:72:GLY:H	3	0.43
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA2	14	0.43
(1,1182)	1:A:50:TRP:HH2	1:A:136:LEU:HB2	15	0.43
(1,1153)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HG2	8	0.43
(1,1151)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HA	6	0.43
(1,1119)	1:A:46:ARG:HD2	1:A:139:PHE:HE1	13	0.43
(1,1014)	1:A:38:TRP:HZ2	1:A:79:PRO:HG2	18	0.43
(1,766)	1:A:29:ARG:HE	1:A:104:GLU:HB2	4	0.42
(1,600)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:174:TRP:HZ3	13	0.42
(1,494)	1:A:20:GLU:H	1:A:20:GLU:HG2	1	0.42
(1,458)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:18:ALA:H	13	0.42
(1,390)	1:A:14:ARG:HA	1:A:14:ARG:HG2	13	0.42
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD11	19	0.42
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD12	19	0.42
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD13	19	0.42
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD11	8	0.42
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD12	8	0.42
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD13	8	0.42
(1,2552)	1:A:166:ILE:HG12	1:A:167:SER:HA	3	0.42
(1,2547)	1:A:166:ILE:HB	1:A:169:GLU:HG2	4	0.42
(1,2516)	1:A:164:MET:HE1	1:A:168:GLN:HE21	10	0.42
(1,2516)	1:A:164:MET:HE2	1:A:168:GLN:HE21	10	0.42
(1,2516)	1:A:164:MET:HE3	1:A:168:GLN:HE21	10	0.42
(1,2480)	1:A:161:PRO:HG2	1:A:162:GLU:H	15	0.42
(1,2480)	1:A:161:PRO:HG2	1:A:162:GLU:H	18	0.42
(1,2467)	1:A:160:SER:H	1:A:164:MET:HG2	4	0.42
(1,2459)	1:A:158:GLU:HA	1:A:159:PRO:HG2	8	0.42



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,241)	1:A:8:GLU:HG2	1:A:9:ARG:H	10	0.42
(1,2137)	1:A:124:GLU:HB2	1:A:125:VAL:H	1	0.42
(1,2137)	1:A:124:GLU:HB2	1:A:125:VAL:H	16	0.42
(1,2137)	1:A:124:GLU:HB2	1:A:125:VAL:H	17	0.42
(1,2038)	1:A:119:GLU:HB2	1:A:120:GLN:H	17	0.42
(1,1999)	1:A:116:THR:HG21	1:A:121:MET:HB2	12	0.42
(1,1999)	1:A:116:THR:HG22	1:A:121:MET:HB2	12	0.42
(1,1999)	1:A:116:THR:HG23	1:A:121:MET:HB2	12	0.42
(1,193)	1:A:5:GLN:H	1:A:5:GLN:HB2	10	0.42
(1,1715)	1:A:92:LYS:HE2	1:A:121:MET:HE1	6	0.42
(1,1715)	1:A:92:LYS:HE2	1:A:121:MET:HE2	6	0.42
(1,1715)	1:A:92:LYS:HE2	1:A:121:MET:HE3	6	0.42
(1,1349)	1:A:63:ASN:HB2	1:A:64:PHE:H	6	0.42
(1,1275)	1:A:55:LYS:HG2	1:A:56:GLY:H	8	0.42
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD11	17	0.42
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD12	17	0.42
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD13	17	0.42
(1,1018)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:39:SER:HB2	3	0.42
(1,895)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:HB2	20	0.41
(1,895)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:HB2	20	0.41
(1,895)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:HB2	20	0.41
(1,888)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HA	8	0.41
(1,888)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HA	8	0.41
(1,888)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HA	8	0.41
(1,866)	1:A:33:PRO:HG2	1:A:34:VAL:H	3	0.41
(1,781)	1:A:30:TYR:HA	1:A:30:TYR:HD1	7	0.41
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD21	20	0.41
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD22	20	0.41
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD23	20	0.41
(1,600)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:174:TRP:HZ3	17	0.41
(1,458)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:18:ALA:H	20	0.41
(1,346)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:22:ARG:HG2	18	0.41
(1,346)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:22:ARG:HG2	18	0.41
(1,346)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:22:ARG:HG2	18	0.41
(1,269)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:174:TRP:HE1	20	0.41
(1,2530)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:168:GLN:HG2	10	0.41
(1,2524)	1:A:165:ARG:HA	1:A:168:GLN:HB2	4	0.41
(1,2522)	1:A:165:ARG:HA	1:A:165:ARG:HG2	1	0.41
(1,2471)	1:A:160:SER:HB2	1:A:162:GLU:H	9	0.41
(1,2392)	1:A:148:PRO:HD2	1:A:149:VAL:H	12	0.41
(1,2379)	1:A:144:LEU:HA	1:A:145:PRO:HD2	19	0.41
(1,2378)	1:A:144:LEU:HA	1:A:144:LEU:HD11	12	0.41



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2378)	1:A:144:LEU:HA	1:A:144:LEU:HD12	12	0.41
(1,2378)	1:A:144:LEU:HA	1:A:144:LEU:HD13	12	0.41
(1,2038)	1:A:119:GLU:HB2	1:A:120:GLN:H	11	0.41
(1,193)	1:A:5:GLN:H	1:A:5:GLN:HB2	18	0.41
(1,1861)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:108:THR:H	19	0.41
(1,1860)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:107:GLY:H	1	0.41
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HG	1	0.41
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HG	1	0.41
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HG	1	0.41
(1,1541)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:81:ARG:HG2	6	0.41
(1,1541)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:81:ARG:HG2	6	0.41
(1,1532)	1:A:78:GLU:H	1:A:81:ARG:HB2	12	0.41
(1,1530)	1:A:78:GLU:H	1:A:79:PRO:HB2	1	0.41
(1,1419)	1:A:69:ASN:HA	1:A:89:TYR:HD1	3	0.41
(1,1388)	1:A:66:LEU:H	1:A:71:SER:HB2	4	0.41
(1,1388)	1:A:66:LEU:H	1:A:71:SER:HB2	17	0.41
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:68:GLY:HA2	6	0.41
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:68:GLY:HA2	6	0.41
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:68:GLY:HA2	6	0.41
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD21	12	0.41
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD22	12	0.41
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD23	12	0.41
(1,1155)	1:A:49:ARG:H	1:A:49:ARG:HD2	17	0.41
(1,1118)	1:A:46:ARG:HD2	1:A:139:PHE:HZ	12	0.41
(1,1104)	1:A:46:ARG:H	1:A:47:ILE:HG12	1	0.41
(1,1104)	1:A:46:ARG:H	1:A:47:ILE:HG12	19	0.41
(1,935)	1:A:36:GLU:HA	1:A:36:GLU:HG2	6	0.4
(1,820)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:37:VAL:HG11	17	0.4
(1,820)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:37:VAL:HG12	17	0.4
(1,820)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:37:VAL:HG13	17	0.4
(1,600)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:174:TRP:HZ3	4	0.4
(1,270)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:174:TRP:HA	4	0.4
(1,2577)	1:A:169:GLU:HA	1:A:172:GLU:HB2	10	0.4
(1,2570)	1:A:168:GLN:HB2	1:A:168:GLN:HE22	14	0.4
(1,2441)	1:A:155:GLU:HA	1:A:155:GLU:HG2	11	0.4
(1,2439)	1:A:155:GLU:H	1:A:155:GLU:HB2	14	0.4
(1,2418)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:H	18	0.4
(1,2386)	1:A:147:GLY:H	1:A:148:PRO:HD2	15	0.4
(1,2383)	1:A:145:PRO:HB2	1:A:146:GLY:H	16	0.4
(1,2362)	1:A:141:ARG:HG2	1:A:142:GLY:H	15	0.4
(1,2360)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:143:ASP:H	15	0.4
(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB1	10	0.4



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB2	10	0.4
(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB3	10	0.4
(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB1	18	0.4
(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB2	18	0.4
(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB3	18	0.4
(1,217)	1:A:7:THR:HG21	1:A:27:ARG:HB2	1	0.4
(1,217)	1:A:7:THR:HG22	1:A:27:ARG:HB2	1	0.4
(1,217)	1:A:7:THR:HG23	1:A:27:ARG:HB2	1	0.4
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HB2	18	0.4
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HB2	18	0.4
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HB2	18	0.4
(1,1705)	1:A:92:LYS:H	1:A:92:LYS:HB2	8	0.4
(1,1648)	1:A:87:TRP:HE1	1:A:89:TYR:HD1	12	0.4
(1,1569)	1:A:82:ARG:HD2	1:A:100:ARG:HB2	8	0.4
(1,1568)	1:A:82:ARG:HB2	1:A:82:ARG:HD2	16	0.4
(1,1534)	1:A:78:GLU:H	1:A:82:ARG:HG2	4	0.4
(1,1530)	1:A:78:GLU:H	1:A:79:PRO:HB2	12	0.4
(1,1319)	1:A:59:ARG:HG2	1:A:59:ARG:HE	14	0.4
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD11	18	0.4
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD12	18	0.4
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD13	18	0.4
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD11	18	0.4
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD12	18	0.4
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD13	18	0.4
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD11	18	0.4
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD12	18	0.4
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD13	18	0.4
(1,1054)	1:A:41:CYS:H	1:A:99:LEU:HD11	8	0.4
(1,1054)	1:A:41:CYS:H	1:A:99:LEU:HD12	8	0.4
(1,1054)	1:A:41:CYS:H	1:A:99:LEU:HD13	8	0.4
(1,1024)	1:A:39:SER:HB2	1:A:46:ARG:HD2	12	0.4
(1,996)	1:A:38:TRP:HD1	1:A:80:PRO:HB2	9	0.39
(1,819)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:140:ILE:HD11	15	0.39
(1,819)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:140:ILE:HD12	15	0.39
(1,819)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:140:ILE:HD13	15	0.39
(1,600)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:174:TRP:HZ3	20	0.39
(1,390)	1:A:14:ARG:HA	1:A:14:ARG:HG2	2	0.39
(1,390)	1:A:14:ARG:HA	1:A:14:ARG:HG2	8	0.39
(1,366)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HB2	12	0.39
(1,335)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:22:ARG:HD2	17	0.39
(1,335)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:22:ARG:HD2	17	0.39
(1,335)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:22:ARG:HD2	17	0.39



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,269)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:174:TRP:HE1	15	0.39
(1,2591)	1:A:171:GLY:H	1:A:172:GLU:HG2	20	0.39
(1,2578)	1:A:169:GLU:HA	1:A:172:GLU:HG2	2	0.39
(1,2571)	1:A:168:GLN:HB2	1:A:169:GLU:H	7	0.39
(1,2529)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:166:ILE:H	8	0.39
(1,2526)	1:A:165:ARG:HA	1:A:168:GLN:HG2	2	0.39
(1,2522)	1:A:165:ARG:HA	1:A:165:ARG:HG2	10	0.39
(1,2522)	1:A:165:ARG:HA	1:A:165:ARG:HG2	11	0.39
(1,2486)	1:A:162:GLU:HA	1:A:162:GLU:HG2	5	0.39
(1,2442)	1:A:155:GLU:HB2	1:A:156:GLU:H	15	0.39
(1,2424)	1:A:152:ASP:H	1:A:153:ALA:H	9	0.39
(1,238)	1:A:8:GLU:HB2	1:A:27:ARG:HD2	14	0.39
(1,200)	1:A:5:GLN:HG2	1:A:6:ALA:H	16	0.39
(1,200)	1:A:5:GLN:HG2	1:A:6:ALA:H	17	0.39
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	9	0.39
(1,1610)	1:A:85:ILE:H	1:A:98:GLU:HB2	7	0.39
(1,1566)	1:A:82:ARG:HB2	1:A:100:ARG:HA	4	0.39
(1,1426)	1:A:70:ALA:H	1:A:89:TYR:HD1	12	0.39
(1,1285)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HA	1	0.39
(1,1285)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HA	8	0.39
(1,1275)	1:A:55:LYS:HG2	1:A:56:GLY:H	19	0.39
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE1	1	0.39
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE1	16	0.39
(1,1069)	1:A:43:ASP:HB2	1:A:45:ASN:H	4	0.39
(1,1014)	1:A:38:TRP:HZ2	1:A:79:PRO:HG2	2	0.39
(1,939)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:37:VAL:H	1	0.38
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	15	0.38
(1,781)	1:A:30:TYR:HA	1:A:30:TYR:HD1	20	0.38
(1,752)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD11	15	0.38
(1,752)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD12	15	0.38
(1,752)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD13	15	0.38
(1,459)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:19:GLY:H	15	0.38
(1,458)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:18:ALA:H	14	0.38
(1,408)	1:A:14:ARG:HD2	1:A:16:ILE:HG21	11	0.38
(1,408)	1:A:14:ARG:HD2	1:A:16:ILE:HG22	11	0.38
(1,408)	1:A:14:ARG:HD2	1:A:16:ILE:HG23	11	0.38
(1,390)	1:A:14:ARG:HA	1:A:14:ARG:HG2	1	0.38
(1,390)	1:A:14:ARG:HA	1:A:14:ARG:HG2	5	0.38
(1,390)	1:A:14:ARG:HA	1:A:14:ARG:HG2	14	0.38
(1,390)	1:A:14:ARG:HA	1:A:14:ARG:HG2	19	0.38
(1,346)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:22:ARG:HG2	11	0.38
(1,346)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:22:ARG:HG2	11	0.38



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,346)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:22:ARG:HG2	11	0.38
(1,2530)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:168:GLN:HG2	19	0.38
(1,2418)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:H	19	0.38
(1,240)	1:A:8:GLU:HG2	1:A:27:ARG:HB2	19	0.38
(1,2378)	1:A:144:LEU:HA	1:A:144:LEU:HD11	9	0.38
(1,2378)	1:A:144:LEU:HA	1:A:144:LEU:HD12	9	0.38
(1,2378)	1:A:144:LEU:HA	1:A:144:LEU:HD13	9	0.38
(1,2358)	1:A:141:ARG:HA	1:A:141:ARG:HG2	6	0.38
(1,2329)	1:A:139:PHE:HB3	1:A:144:LEU:HD11	5	0.38
(1,2329)	1:A:139:PHE:HB3	1:A:144:LEU:HD12	5	0.38
(1,2329)	1:A:139:PHE:HB3	1:A:144:LEU:HD13	5	0.38
(1,2137)	1:A:124:GLU:HB2	1:A:125:VAL:H	7	0.38
(1,2137)	1:A:124:GLU:HB2	1:A:125:VAL:H	13	0.38
(1,195)	1:A:5:GLN:HA	1:A:5:GLN:HG2	10	0.38
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:105:GLY:H	6	0.38
(1,1649)	1:A:87:TRP:HE1	1:A:89:TYR:HE1	13	0.38
(1,1531)	1:A:78:GLU:H	1:A:79:PRO:HD2	17	0.38
(1,1451)	1:A:71:SER:HB2	1:A:72:GLY:H	13	0.38
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:68:GLY:HA2	10	0.38
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:68:GLY:HA2	10	0.38
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:68:GLY:HA2	10	0.38
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD11	15	0.38
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD12	15	0.38
(1,1207)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD13	15	0.38
(1,1206)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:52:ILE:HD11	11	0.38
(1,1206)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:52:ILE:HD12	11	0.38
(1,1206)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:52:ILE:HD13	11	0.38
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE1	5	0.38
(1,1182)	1:A:50:TRP:HH2	1:A:136:LEU:HB2	14	0.38
(1,1030)	1:A:40:ALA:H	1:A:46:ARG:HD2	9	0.38
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD11	3	0.38
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD12	3	0.38
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD13	3	0.38
(1,1001)	1:A:38:TRP:HE1	1:A:79:PRO:HG2	16	0.38
(1,935)	1:A:36:GLU:HA	1:A:36:GLU:HG2	1	0.37
(1,929)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:39:SER:H	12	0.37
(1,895)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:HB2	15	0.37
(1,895)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:HB2	15	0.37
(1,895)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:HB2	15	0.37
(1,841)	1:A:32:ALA:HA	1:A:36:GLU:HB2	14	0.37
(1,816)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:133:LEU:HD11	9	0.37
(1,816)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:133:LEU:HD12	9	0.37



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,816)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:133:LEU:HD13	9	0.37
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD11	14	0.37
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD12	14	0.37
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD13	14	0.37
(1,706)	1:A:26:ILE:HG21	1:A:28:GLN:HG2	10	0.37
(1,706)	1:A:26:ILE:HG22	1:A:28:GLN:HG2	10	0.37
(1,706)	1:A:26:ILE:HG23	1:A:28:GLN:HG2	10	0.37
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD21	8	0.37
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD22	8	0.37
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD23	8	0.37
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD21	12	0.37
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD22	12	0.37
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD23	12	0.37
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD11	6	0.37
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD12	6	0.37
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD13	6	0.37
(1,269)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:174:TRP:HE1	9	0.37
(1,2576)	1:A:169:GLU:HA	1:A:169:GLU:HG2	13	0.37
(1,2570)	1:A:168:GLN:HB2	1:A:168:GLN:HE22	19	0.37
(1,2529)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:166:ILE:H	3	0.37
(1,2477)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HG2	6	0.37
(1,2471)	1:A:160:SER:HB2	1:A:162:GLU:H	13	0.37
(1,2454)	1:A:158:GLU:H	1:A:158:GLU:HB2	12	0.37
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:150:PRO:HD2	19	0.37
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:150:PRO:HD2	19	0.37
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:150:PRO:HD2	19	0.37
(1,2387)	1:A:147:GLY:HA2	1:A:148:PRO:HD2	2	0.37
(1,2378)	1:A:144:LEU:HA	1:A:144:LEU:HD11	11	0.37
(1,2378)	1:A:144:LEU:HA	1:A:144:LEU:HD12	11	0.37
(1,2378)	1:A:144:LEU:HA	1:A:144:LEU:HD13	11	0.37
(1,2378)	1:A:144:LEU:HA	1:A:144:LEU:HD11	15	0.37
(1,2378)	1:A:144:LEU:HA	1:A:144:LEU:HD12	15	0.37
(1,2378)	1:A:144:LEU:HA	1:A:144:LEU:HD13	15	0.37
(1,2367)	1:A:143:ASP:H	1:A:144:LEU:HB2	8	0.37
(1,2330)	1:A:139:PHE:HB2	1:A:141:ARG:H	11	0.37
(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD11	19	0.37
(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD12	19	0.37
(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD13	19	0.37
(1,2302)	1:A:138:MET:HA	1:A:141:ARG:HB2	17	0.37
(1,2131)	1:A:124:GLU:HA	1:A:124:GLU:HG2	4	0.37
(1,2038)	1:A:119:GLU:HB2	1:A:120:GLN:H	6	0.37
(1,200)	1:A:5:GLN:HG2	1:A:6:ALA:H	10	0.37



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1687)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HE2	6	0.37
(1,1648)	1:A:87:TRP:HE1	1:A:89:TYR:HD1	7	0.37
(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD11	15	0.37
(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD12	15	0.37
(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD13	15	0.37
(1,1286)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HB2	9	0.37
(1,1285)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HA	20	0.37
(1,1182)	1:A:50:TRP:HH2	1:A:136:LEU:HB2	1	0.37
(1,1163)	1:A:49:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HD1	2	0.37
(1,1163)	1:A:49:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HD2	2	0.37
(1,1152)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HB2	10	0.37
(1,1104)	1:A:46:ARG:H	1:A:47:ILE:HG12	18	0.37
(1,1071)	1:A:43:ASP:HB2	1:A:46:ARG:HB2	12	0.37
(1,939)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:37:VAL:H	16	0.36
(1,895)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:HB2	17	0.36
(1,895)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:HB2	17	0.36
(1,895)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:HB2	17	0.36
(1,841)	1:A:32:ALA:HA	1:A:36:GLU:HB2	9	0.36
(1,817)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:136:LEU:HD21	19	0.36
(1,817)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:136:LEU:HD22	19	0.36
(1,817)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:136:LEU:HD23	19	0.36
(1,335)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:22:ARG:HD2	19	0.36
(1,335)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:22:ARG:HD2	19	0.36
(1,335)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:22:ARG:HD2	19	0.36
(1,2685)	1:A:177:LEU:HD21	1:A:180:SER:HB2	14	0.36
(1,2685)	1:A:177:LEU:HD22	1:A:180:SER:HB2	14	0.36
(1,2685)	1:A:177:LEU:HD23	1:A:180:SER:HB2	14	0.36
(1,2563)	1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HE21	7	0.36
(1,2529)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:166:ILE:H	7	0.36
(1,2522)	1:A:165:ARG:HA	1:A:165:ARG:HG2	18	0.36
(1,2516)	1:A:164:MET:HE1	1:A:168:GLN:HE21	16	0.36
(1,2516)	1:A:164:MET:HE2	1:A:168:GLN:HE21	16	0.36
(1,2516)	1:A:164:MET:HE3	1:A:168:GLN:HE21	16	0.36
(1,2456)	1:A:158:GLU:H	1:A:159:PRO:HD2	4	0.36
(1,2358)	1:A:141:ARG:HA	1:A:141:ARG:HG2	8	0.36
(1,2178)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:131:MET:HG2	16	0.36
(1,2178)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:131:MET:HG2	16	0.36
(1,2178)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:131:MET:HG2	16	0.36
(1,2137)	1:A:124:GLU:HB2	1:A:125:VAL:H	2	0.36
(1,2137)	1:A:124:GLU:HB2	1:A:125:VAL:H	3	0.36
(1,2131)	1:A:124:GLU:HA	1:A:124:GLU:HG2	5	0.36
(1,2131)	1:A:124:GLU:HA	1:A:124:GLU:HG2	7	0.36



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1999)	1:A:116:THR:HG21	1:A:121:MET:HB2	3	0.36
(1,1999)	1:A:116:THR:HG22	1:A:121:MET:HB2	3	0.36
(1,1999)	1:A:116:THR:HG23	1:A:121:MET:HB2	3	0.36
(1,1959)	1:A:113:GLU:HG2	1:A:114:HIS:H	2	0.36
(1,195)	1:A:5:GLN:HA	1:A:5:GLN:HG2	17	0.36
(1,1722)	1:A:94:ASP:H	1:A:94:ASP:HB2	9	0.36
(1,1672)	1:A:89:TYR:HA	1:A:89:TYR:HD1	3	0.36
(1,1532)	1:A:78:GLU:H	1:A:81:ARG:HB2	8	0.36
(1,1530)	1:A:78:GLU:H	1:A:79:PRO:HB2	16	0.36
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD21	9	0.36
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD22	9	0.36
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD23	9	0.36
(1,1406)	1:A:67:GLN:HA	1:A:67:GLN:HG2	4	0.36
(1,1243)	1:A:53:GLU:H	1:A:54:PRO:HD2	3	0.36
(1,935)	1:A:36:GLU:HA	1:A:36:GLU:HG2	8	0.35
(1,776)	1:A:29:ARG:HG2	1:A:30:TYR:H	14	0.35
(1,747)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HB2	13	0.35
(1,642)	1:A:25:ILE:HG21	1:A:113:GLU:HB2	6	0.35
(1,642)	1:A:25:ILE:HG22	1:A:113:GLU:HB2	6	0.35
(1,642)	1:A:25:ILE:HG23	1:A:113:GLU:HB2	6	0.35
(1,632)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:113:GLU:HG2	2	0.35
(1,632)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:113:GLU:HG2	2	0.35
(1,632)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:113:GLU:HG2	2	0.35
(1,603)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:114:HIS:HB2	5	0.35
(1,603)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:114:HIS:HB2	5	0.35
(1,603)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:114:HIS:HB2	5	0.35
(1,603)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:114:HIS:HB2	19	0.35
(1,603)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:114:HIS:HB2	19	0.35
(1,603)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:114:HIS:HB2	19	0.35
(1,401)	1:A:14:ARG:HE	1:A:96:GLU:HG2	3	0.35
(1,384)	1:A:14:ARG:H	1:A:20:GLU:HB2	6	0.35
(1,367)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HD2	2	0.35
(1,321)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:24:ILE:HG21	11	0.35
(1,321)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:24:ILE:HG22	11	0.35
(1,321)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:24:ILE:HG23	11	0.35
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD11	1	0.35
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD12	1	0.35
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD13	1	0.35
(1,2563)	1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HE21	2	0.35
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:169:GLU:HG2	5	0.35
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:169:GLU:HG2	5	0.35
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:169:GLU:HG2	5	0.35



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2532)	1:A:165:ARG:HG2	1:A:169:GLU:HG2	6	0.35
(1,2529)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:166:ILE:H	10	0.35
(1,2529)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:166:ILE:H	13	0.35
(1,2477)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HG2	8	0.35
(1,2461)	1:A:158:GLU:HB2	1:A:159:PRO:HD2	20	0.35
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB1	17	0.35
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB2	17	0.35
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB3	17	0.35
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB1	18	0.35
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB2	18	0.35
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB3	18	0.35
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB1	19	0.35
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB2	19	0.35
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB3	19	0.35
(1,2418)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:H	7	0.35
(1,2413)	1:A:150:PRO:HG2	1:A:152:ASP:H	10	0.35
(1,2383)	1:A:145:PRO:HB2	1:A:146:GLY:H	20	0.35
(1,2161)	1:A:126:GLY:HA2	1:A:174:TRP:HZ3	20	0.35
(1,2137)	1:A:124:GLU:HB2	1:A:125:VAL:H	10	0.35
(1,2137)	1:A:124:GLU:HB2	1:A:125:VAL:H	11	0.35
(1,2038)	1:A:119:GLU:HB2	1:A:120:GLN:H	16	0.35
(1,1999)	1:A:116:THR:HG21	1:A:121:MET:HB2	20	0.35
(1,1999)	1:A:116:THR:HG22	1:A:121:MET:HB2	20	0.35
(1,1999)	1:A:116:THR:HG23	1:A:121:MET:HB2	20	0.35
(1,193)	1:A:5:GLN:H	1:A:5:GLN:HB2	3	0.35
(1,1869)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:HD21	17	0.35
(1,1869)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:HD22	17	0.35
(1,1869)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:HD23	17	0.35
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	6	0.35
(1,1712)	1:A:92:LYS:HB2	1:A:92:LYS:HD2	9	0.35
(1,1703)	1:A:90:GLU:HG2	1:A:91:GLY:H	19	0.35
(1,1530)	1:A:78:GLU:H	1:A:79:PRO:HB2	6	0.35
(1,1451)	1:A:71:SER:HB2	1:A:72:GLY:H	19	0.35
(1,1328)	1:A:60:GLU:HG3	1:A:61:GLY:H	11	0.35
(1,1246)	1:A:53:GLU:HG2	1:A:54:PRO:HD2	14	0.35
(1,1202)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:129:TRP:HH2	14	0.35
(1,1166)	1:A:49:ARG:HD2	1:A:139:PHE:HE1	15	0.35
(1,1110)	1:A:46:ARG:HA	1:A:49:ARG:HG2	18	0.35
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD11	13	0.35
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD12	13	0.35
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD13	13	0.35
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD11	13	0.35



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD12	13	0.35
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD13	13	0.35
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD11	13	0.35
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD12	13	0.35
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD13	13	0.35
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD11	3	0.34
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD12	3	0.34
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD13	3	0.34
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG2	16	0.34
(1,807)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HG21	14	0.34
(1,807)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HG22	14	0.34
(1,807)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HG23	14	0.34
(1,806)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HD11	12	0.34
(1,806)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HD12	12	0.34
(1,806)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HD13	12	0.34
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD11	18	0.34
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD12	18	0.34
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD13	18	0.34
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG21	20	0.34
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG22	20	0.34
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG23	20	0.34
(1,366)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HB2	10	0.34
(1,2710)	1:A:180:SER:H	1:A:180:SER:HB2	12	0.34
(1,2577)	1:A:169:GLU:HA	1:A:172:GLU:HB2	17	0.34
(1,2570)	1:A:168:GLN:HB2	1:A:168:GLN:HE22	15	0.34
(1,2529)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:166:ILE:H	15	0.34
(1,2529)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:166:ILE:H	20	0.34
(1,2486)	1:A:162:GLU:HA	1:A:162:GLU:HG2	2	0.34
(1,2480)	1:A:161:PRO:HG2	1:A:162:GLU:H	8	0.34
(1,2480)	1:A:161:PRO:HG2	1:A:162:GLU:H	9	0.34
(1,2480)	1:A:161:PRO:HG2	1:A:162:GLU:H	13	0.34
(1,2457)	1:A:158:GLU:HA	1:A:158:GLU:HG2	6	0.34
(1,2445)	1:A:156:GLU:HA	1:A:156:GLU:HG2	4	0.34
(1,2417)	1:A:151:GLU:HA	1:A:151:GLU:HG2	3	0.34
(1,2413)	1:A:150:PRO:HG2	1:A:152:ASP:H	5	0.34
(1,2392)	1:A:148:PRO:HD2	1:A:149:VAL:H	15	0.34
(1,2360)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:143:ASP:H	2	0.34
(1,2330)	1:A:139:PHE:HB2	1:A:141:ARG:H	5	0.34
(1,2330)	1:A:139:PHE:HB2	1:A:141:ARG:H	19	0.34
(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB1	15	0.34
(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB2	15	0.34
(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB3	15	0.34



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,218)	1:A:7:THR:HG21	1:A:28:GLN:HE21	13	0.34
(1,218)	1:A:7:THR:HG22	1:A:28:GLN:HE21	13	0.34
(1,218)	1:A:7:THR:HG23	1:A:28:GLN:HE21	13	0.34
(1,2137)	1:A:124:GLU:HB2	1:A:125:VAL:H	8	0.34
(1,195)	1:A:5:GLN:HA	1:A:5:GLN:HG2	7	0.34
(1,195)	1:A:5:GLN:HA	1:A:5:GLN:HG2	8	0.34
(1,1861)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:108:THR:H	8	0.34
(1,1860)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:107:GLY:H	3	0.34
(1,1856)	1:A:104:GLU:HA	1:A:104:GLU:HG2	18	0.34
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD11	12	0.34
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD12	12	0.34
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD13	12	0.34
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD11	14	0.34
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD12	14	0.34
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD13	14	0.34
(1,1706)	1:A:92:LYS:H	1:A:92:LYS:HD2	20	0.34
(1,1703)	1:A:90:GLU:HG2	1:A:91:GLY:H	14	0.34
(1,1669)	1:A:88:VAL:HG21	1:A:94:ASP:HB2	11	0.34
(1,1669)	1:A:88:VAL:HG22	1:A:94:ASP:HB2	11	0.34
(1,1669)	1:A:88:VAL:HG23	1:A:94:ASP:HB2	11	0.34
(1,1621)	1:A:85:ILE:HD11	1:A:99:LEU:HB2	6	0.34
(1,1621)	1:A:85:ILE:HD12	1:A:99:LEU:HB2	6	0.34
(1,1621)	1:A:85:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HB2	6	0.34
(1,1568)	1:A:82:ARG:HB2	1:A:82:ARG:HD2	15	0.34
(1,1530)	1:A:78:GLU:H	1:A:79:PRO:HB2	15	0.34
(1,1507)	1:A:75:LEU:HD21	1:A:86:SER:HB2	6	0.34
(1,1507)	1:A:75:LEU:HD22	1:A:86:SER:HB2	6	0.34
(1,1507)	1:A:75:LEU:HD23	1:A:86:SER:HB2	6	0.34
(1,1452)	1:A:71:SER:HB2	1:A:88:VAL:HB	5	0.34
(1,1388)	1:A:66:LEU:H	1:A:71:SER:HB2	2	0.34
(1,1202)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:129:TRP:HH2	2	0.34
(1,1165)	1:A:49:ARG:HB2	1:A:49:ARG:HD2	1	0.34
(1,1122)	1:A:46:ARG:HG2	1:A:47:ILE:H	17	0.34
(1,1104)	1:A:46:ARG:H	1:A:47:ILE:HG12	17	0.34
(1,1054)	1:A:41:CYS:H	1:A:99:LEU:HD11	19	0.34
(1,1054)	1:A:41:CYS:H	1:A:99:LEU:HD12	19	0.34
(1,1054)	1:A:41:CYS:H	1:A:99:LEU:HD13	19	0.34
(1,1014)	1:A:38:TRP:HZ2	1:A:79:PRO:HG2	13	0.34
(1,1014)	1:A:38:TRP:HZ2	1:A:79:PRO:HG2	15	0.34
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG21	20	0.33
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG22	20	0.33
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG23	20	0.33



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,631)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:113:GLU:HB2	2	0.33
(1,631)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:113:GLU:HB2	2	0.33
(1,631)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:113:GLU:HB2	2	0.33
(1,600)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:174:TRP:HZ3	8	0.33
(1,458)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:18:ALA:H	16	0.33
(1,390)	1:A:14:ARG:HA	1:A:14:ARG:HG2	10	0.33
(1,388)	1:A:14:ARG:H	1:A:22:ARG:HG2	17	0.33
(1,346)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:22:ARG:HG2	10	0.33
(1,346)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:22:ARG:HG2	10	0.33
(1,346)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:22:ARG:HG2	10	0.33
(1,269)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:174:TRP:HE1	8	0.33
(1,2552)	1:A:166:ILE:HG12	1:A:167:SER:HA	7	0.33
(1,2529)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:166:ILE:H	1	0.33
(1,2522)	1:A:165:ARG:HA	1:A:165:ARG:HG2	20	0.33
(1,2486)	1:A:162:GLU:HA	1:A:162:GLU:HG2	17	0.33
(1,2465)	1:A:159:PRO:HG2	1:A:160:SER:H	3	0.33
(1,2418)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:H	5	0.33
(1,2417)	1:A:151:GLU:HA	1:A:151:GLU:HG2	6	0.33
(1,2413)	1:A:150:PRO:HG2	1:A:152:ASP:H	19	0.33
(1,2388)	1:A:147:GLY:HA2	1:A:148:PRO:HD3	9	0.33
(1,2378)	1:A:144:LEU:HA	1:A:144:LEU:HD11	17	0.33
(1,2378)	1:A:144:LEU:HA	1:A:144:LEU:HD12	17	0.33
(1,2378)	1:A:144:LEU:HA	1:A:144:LEU:HD13	17	0.33
(1,2364)	1:A:142:GLY:H	1:A:144:LEU:HB2	10	0.33
(1,2350)	1:A:140:ILE:HG21	1:A:141:ARG:HG2	16	0.33
(1,2350)	1:A:140:ILE:HG22	1:A:141:ARG:HG2	16	0.33
(1,2350)	1:A:140:ILE:HG23	1:A:141:ARG:HG2	16	0.33
(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB1	9	0.33
(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB2	9	0.33
(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB3	9	0.33
(1,2221)	1:A:130:GLU:HG2	1:A:174:TRP:HZ2	17	0.33
(1,2178)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:131:MET:HG2	20	0.33
(1,2178)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:131:MET:HG2	20	0.33
(1,2178)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:131:MET:HG2	20	0.33
(1,2139)	1:A:124:GLU:HG2	1:A:125:VAL:HA	12	0.33
(1,2042)	1:A:119:GLU:HG2	1:A:178:VAL:HG11	9	0.33
(1,2042)	1:A:119:GLU:HG2	1:A:178:VAL:HG12	9	0.33
(1,2042)	1:A:119:GLU:HG2	1:A:178:VAL:HG13	9	0.33
(1,195)	1:A:5:GLN:HA	1:A:5:GLN:HG2	9	0.33
(1,1875)	1:A:106:ASP:H	1:A:106:ASP:HB2	18	0.33
(1,1856)	1:A:104:GLU:HA	1:A:104:GLU:HG2	9	0.33
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD11	1	0.33



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD12	1	0.33
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD13	1	0.33
(1,1718)	1:A:92:LYS:HG2	1:A:93:PRO:HD2	9	0.33
(1,1712)	1:A:92:LYS:HB2	1:A:92:LYS:HD2	18	0.33
(1,1556)	1:A:81:ARG:HB2	1:A:81:ARG:HD2	12	0.33
(1,1531)	1:A:78:GLU:H	1:A:79:PRO:HD2	3	0.33
(1,1318)	1:A:59:ARG:HB2	1:A:59:ARG:HD2	7	0.33
(1,1275)	1:A:55:LYS:HG2	1:A:56:GLY:H	1	0.33
(1,1274)	1:A:55:LYS:HG2	1:A:55:LYS:HE2	16	0.33
(1,1267)	1:A:55:LYS:HA	1:A:55:LYS:HG2	8	0.33
(1,1182)	1:A:50:TRP:HH2	1:A:136:LEU:HB2	12	0.33
(1,1104)	1:A:46:ARG:H	1:A:47:ILE:HG12	14	0.33
(1,1014)	1:A:38:TRP:HZ2	1:A:79:PRO:HG2	12	0.33
(1,1014)	1:A:38:TRP:HZ2	1:A:79:PRO:HG2	14	0.33
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD11	18	0.33
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD12	18	0.33
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD13	18	0.33
(1,895)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:HB2	4	0.32
(1,895)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:HB2	4	0.32
(1,895)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:HB2	4	0.32
(1,806)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HD11	18	0.32
(1,806)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HD12	18	0.32
(1,806)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HD13	18	0.32
(1,805)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:137:GLY:HA2	15	0.32
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD11	10	0.32
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD12	10	0.32
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD13	10	0.32
(1,635)	1:A:25:ILE:HG12	1:A:113:GLU:HA	6	0.32
(1,603)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:114:HIS:HB2	13	0.32
(1,603)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:114:HIS:HB2	13	0.32
(1,603)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:114:HIS:HB2	13	0.32
(1,530)	1:A:22:ARG:HD2	1:A:23:SER:H	13	0.32
(1,520)	1:A:22:ARG:HA	1:A:22:ARG:HG2	3	0.32
(1,496)	1:A:20:GLU:HG2	1:A:21:ALA:H	9	0.32
(1,458)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:18:ALA:H	11	0.32
(1,431)	1:A:16:ILE:H	1:A:20:GLU:HB2	15	0.32
(1,384)	1:A:14:ARG:H	1:A:20:GLU:HB2	7	0.32
(1,366)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HB2	18	0.32
(1,346)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:22:ARG:HG2	4	0.32
(1,346)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:22:ARG:HG2	4	0.32
(1,346)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:22:ARG:HG2	4	0.32
(1,2658)	1:A:176:ALA:HA	1:A:179:HIS:HB2	5	0.32



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2599)	1:A:172:GLU:HA	1:A:172:GLU:HG2	13	0.32
	1:A:172:GLU:HA	1:A:172:GLU:HG2	16	0.32
(1,2576)	1:A:169:GLU:HA	1:A:169:GLU:HG2	11	0.32
(1,2563)	1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HE21	10	0.32
(1,2529)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:166:ILE:H	14	0.32
(1,2522)	1:A:165:ARG:HA	1:A:165:ARG:HG2	5	0.32
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD11	7	0.32
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD12	7	0.32
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD13	7	0.32
(1,2445)	1:A:156:GLU:HA	1:A:156:GLU:HG2	14	0.32
(1,2445)	1:A:156:GLU:HA	1:A:156:GLU:HG2	16	0.32
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB1	1:A:156:GLU:H	2	0.32
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB2	1:A:156:GLU:H	2	0.32
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB3	1:A:156:GLU:H	2	0.32
(1,2417)	1:A:151:GLU:HA	1:A:151:GLU:HG2	4	0.32
(1,2375)	1:A:144:LEU:H	1:A:145:PRO:HD2	12	0.32
(1,2367)	1:A:143:ASP:H	1:A:144:LEU:HB2	7	0.32
(1,2364)	1:A:142:GLY:H	1:A:144:LEU:HB2	9	0.32
(1,2364)	1:A:142:GLY:H	1:A:144:LEU:HB2	15	0.32
(1,2137)	1:A:124:GLU:HB2	1:A:125:VAL:H	5	0.32
(1,2137)	1:A:124:GLU:HB2	1:A:125:VAL:H	12	0.32
(1,2131)	1:A:124:GLU:HA	1:A:124:GLU:HG2	12	0.32
(1,2051)	1:A:120:GLN:HB3	1:A:121:MET:H	19	0.32
(1,1859)	1:A:104:GLU:HA	1:A:107:GLY:H	5	0.32
(1,1718)	1:A:92:LYS:HG2	1:A:93:PRO:HD2	3	0.32
(1,1678)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:H	14	0.32
(1,1653)	1:A:87:TRP:HB2	1:A:95:SER:H	13	0.32
(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD11	12	0.32
(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD12	12	0.32
(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD13	12	0.32
(1,1519)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:84:THR:HB	4	0.32
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA2	16	0.32
(1,1406)	1:A:67:GLN:HA	1:A:67:GLN:HG2	14	0.32
(1,1320)	1:A:59:ARG:HG2	1:A:62:GLY:HA2	15	0.32
(1,1306)	1:A:58:LEU:HB2	1:A:59:ARG:HG2	9	0.32
(1,1267)	1:A:55:LYS:HA	1:A:55:LYS:HG2	15	0.32
(1,1246)	1:A:53:GLU:HG2	1:A:54:PRO:HD2	10	0.32
(1,1182)	1:A:50:TRP:HH2	1:A:136:LEU:HB2	11	0.32
(1,1151)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HA	18	0.32
(1,1018)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:39:SER:HB2	11	0.32
(1,935)	1:A:36:GLU:HA	1:A:36:GLU:HG2	14	0.31
(1,935)	1:A:36:GLU:HA	1:A:36:GLU:HG2	16	0.31



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,935)	1:A:36:GLU:HA	1:A:36:GLU:HG2	20	0.31
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG2	12	0.31
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG21	7	0.31
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG22	7	0.31
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG23	7	0.31
(1,776)	1:A:29:ARG:HG2	1:A:30:TYR:H	13	0.31
(1,774)	1:A:29:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HB2	9	0.31
(1,750)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HE1	14	0.31
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD21	16	0.31
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD22	16	0.31
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD23	16	0.31
(1,461)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:21:ALA:H	17	0.31
(1,458)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:18:ALA:H	6	0.31
(1,381)	1:A:13:ARG:HB2	1:A:13:ARG:HD2	19	0.31
(1,367)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HD2	20	0.31
(1,346)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:22:ARG:HG2	17	0.31
(1,346)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:22:ARG:HG2	17	0.31
(1,346)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:22:ARG:HG2	17	0.31
(1,2563)	1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HE21	19	0.31
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:169:GLU:HG2	14	0.31
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:169:GLU:HG2	14	0.31
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:169:GLU:HG2	14	0.31
(1,2531)	1:A:165:ARG:HG2	1:A:166:ILE:H	13	0.31
(1,2522)	1:A:165:ARG:HA	1:A:165:ARG:HG2	16	0.31
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD11	2	0.31
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD12	2	0.31
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD13	2	0.31
(1,2486)	1:A:162:GLU:HA	1:A:162:GLU:HG2	14	0.31
(1,2458)	1:A:158:GLU:HA	1:A:159:PRO:HD2	8	0.31
(1,2457)	1:A:158:GLU:HA	1:A:158:GLU:HG2	4	0.31
(1,2417)	1:A:151:GLU:HA	1:A:151:GLU:HG2	12	0.31
(1,2414)	1:A:151:GLU:H	1:A:151:GLU:HG2	4	0.31
(1,241)	1:A:8:GLU:HG2	1:A:9:ARG:H	13	0.31
(1,2383)	1:A:145:PRO:HB2	1:A:146:GLY:H	19	0.31
(1,2381)	1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:PRO:HD2	12	0.31
(1,2381)	1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:PRO:HD2	12	0.31
(1,2381)	1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:PRO:HD2	12	0.31
(1,2381)	1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:PRO:HD2	16	0.31
(1,2381)	1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:PRO:HD2	16	0.31
(1,2381)	1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:PRO:HD2	16	0.31
(1,2358)	1:A:141:ARG:HA	1:A:141:ARG:HG2	17	0.31
(1,229)	1:A:8:GLU:HA	1:A:8:GLU:HG2	8	0.31



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2161)	1:A:126:GLY:HA2	1:A:174:TRP:HZ3	17	0.31
	1:A:124:GLU:HG2	1:A:125:VAL:HA	4	0.31
(1,2139)	1:A:124:GLU:HG2	1:A:125:VAL:HA	5	0.31
(1,2137)	1:A:124:GLU:HB2	1:A:125:VAL:H	9	0.31
(1,2137)	1:A:124:GLU:HB2	1:A:125:VAL:H	20	0.31
(1,1856)	1:A:104:GLU:HA	1:A:104:GLU:HG2	6	0.31
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:105:GLY:H	7	0.31
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HD21	17	0.31
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HD22	17	0.31
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HD23	17	0.31
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HD21	17	0.31
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HD22	17	0.31
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HD23	17	0.31
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HD21	17	0.31
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HD22	17	0.31
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HD23	17	0.31
(1,1712)	1:A:92:LYS:HB2	1:A:92:LYS:HD2	6	0.31
(1,1712)	1:A:92:LYS:HB2	1:A:92:LYS:HD2	20	0.31
(1,1696)	1:A:90:GLU:HA	1:A:90:GLU:HG2	9	0.31
(1,1681)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:HG2	7	0.31
(1,1680)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:HD2	11	0.31
(1,1648)	1:A:87:TRP:HE1	1:A:89:TYR:HD1	17	0.31
(1,1345)	1:A:63:ASN:HA	1:A:74:ILE:HG12	10	0.31
(1,1336)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HD11	12	0.31
(1,1336)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HD12	12	0.31
(1,1336)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HD13	12	0.31
(1,1285)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HA	2	0.31
(1,1275)	1:A:55:LYS:HG2	1:A:56:GLY:H	20	0.31
(1,1274)	1:A:55:LYS:HG2	1:A:55:LYS:HE2	17	0.31
(1,1273)	1:A:55:LYS:HD2	1:A:56:GLY:H	6	0.31
(1,1243)	1:A:53:GLU:H	1:A:54:PRO:HD2	17	0.31
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD21	16	0.31
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD22	16	0.31
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD23	16	0.31
(1,1165)	1:A:49:ARG:HB2	1:A:49:ARG:HD2	6	0.31
(1,1165)	1:A:49:ARG:HB2	1:A:49:ARG:HD2	17	0.31
(1,1152)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HB2	15	0.31
(1,935)	1:A:36:GLU:HA	1:A:36:GLU:HG2	15	0.3
(1,837)	1:A:32:ALA:H	1:A:33:PRO:HD2	3	0.3
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG11	11	0.3
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG12	11	0.3
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG13	11	0.3



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG11	13	0.3
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG12	13	0.3
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG13	13	0.3
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	2	0.3
(1,781)	1:A:30:TYR:HA	1:A:30:TYR:HD1	14	0.3
(1,776)	1:A:29:ARG:HG2	1:A:30:TYR:H	12	0.3
(1,773)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:30:TYR:H	9	0.3
(1,767)	1:A:29:ARG:HE	1:A:104:GLU:HG2	3	0.3
(1,748)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HD11	13	0.3
(1,748)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HD12	13	0.3
(1,748)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HD13	13	0.3
(1,600)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:174:TRP:HZ3	5	0.3
(1,600)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:174:TRP:HZ3	7	0.3
(1,545)	1:A:23:SER:HB2	1:A:113:GLU:HG2	2	0.3
(1,520)	1:A:22:ARG:HA	1:A:22:ARG:HG2	12	0.3
(1,390)	1:A:14:ARG:HA	1:A:14:ARG:HG2	11	0.3
(1,390)	1:A:14:ARG:HA	1:A:14:ARG:HG2	15	0.3
(1,346)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:22:ARG:HG2	5	0.3
(1,346)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:22:ARG:HG2	5	0.3
(1,346)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:22:ARG:HG2	5	0.3
(1,269)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:174:TRP:HE1	1	0.3
(1,269)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:174:TRP:HE1	19	0.3
(1,2522)	1:A:165:ARG:HA	1:A:165:ARG:HG2	4	0.3
(1,2522)	1:A:165:ARG:HA	1:A:165:ARG:HG2	14	0.3
(1,2471)	1:A:160:SER:HB2	1:A:162:GLU:H	16	0.3
(1,2470)	1:A:160:SER:HB2	1:A:161:PRO:HD2	8	0.3
(1,2462)	1:A:158:GLU:HG2	1:A:159:PRO:HD2	11	0.3
(1,2445)	1:A:156:GLU:HA	1:A:156:GLU:HG2	5	0.3
(1,2441)	1:A:155:GLU:HA	1:A:155:GLU:HG2	10	0.3
(1,2417)	1:A:151:GLU:HA	1:A:151:GLU:HG2	15	0.3
(1,2400)	1:A:149:VAL:HB	1:A:150:PRO:HD2	7	0.3
(1,2389)	1:A:147:GLY:HA2	1:A:148:PRO:HG2	8	0.3
(1,2383)	1:A:145:PRO:HB2	1:A:146:GLY:H	14	0.3
(1,2364)	1:A:142:GLY:H	1:A:144:LEU:HB2	18	0.3
(1,2137)	1:A:124:GLU:HB2	1:A:125:VAL:H	6	0.3
(1,2131)	1:A:124:GLU:HA	1:A:124:GLU:HG2	18	0.3
(1,2047)	1:A:120:GLN:HA	1:A:120:GLN:HE21	10	0.3
(1,200)	1:A:5:GLN:HG2	1:A:6:ALA:H	2	0.3
(1,195)	1:A:5:GLN:HA	1:A:5:GLN:HG2	16	0.3
(1,195)	1:A:5:GLN:HA	1:A:5:GLN:HG2	18	0.3
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD11	6	0.3
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD12	6	0.3



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD13	6	0.3
(1,1728)	1:A:95:SER:HB2	1:A:114:HIS:HD2	18	0.3
(1,1717)	1:A:92:LYS:HG2	1:A:92:LYS:HE2	8	0.3
(1,1712)	1:A:92:LYS:HB2	1:A:92:LYS:HD2	5	0.3
(1,1712)	1:A:92:LYS:HB2	1:A:92:LYS:HD2	10	0.3
(1,1681)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:HG2	17	0.3
(1,1672)	1:A:89:TYR:HA	1:A:89:TYR:HD1	10	0.3
(1,1653)	1:A:87:TRP:HB2	1:A:95:SER:H	3	0.3
(1,1621)	1:A:85:ILE:HD11	1:A:99:LEU:HB2	14	0.3
(1,1621)	1:A:85:ILE:HD12	1:A:99:LEU:HB2	14	0.3
(1,1621)	1:A:85:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HB2	14	0.3
(1,1556)	1:A:81:ARG:HB2	1:A:81:ARG:HD2	1	0.3
(1,1556)	1:A:81:ARG:HB2	1:A:81:ARG:HD2	14	0.3
(1,1517)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HD2	4	0.3
(1,1238)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:67:GLN:HG2	1	0.3
(1,1238)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:67:GLN:HG2	1	0.3
(1,1238)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:67:GLN:HG2	1	0.3
(1,1238)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:67:GLN:HG2	13	0.3
(1,1238)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:67:GLN:HG2	13	0.3
(1,1238)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:67:GLN:HG2	13	0.3
(1,1165)	1:A:49:ARG:HB2	1:A:49:ARG:HD2	4	0.3
(1,1160)	1:A:49:ARG:HA	1:A:49:ARG:HD2	17	0.3
(1,1104)	1:A:46:ARG:H	1:A:47:ILE:HG12	2	0.3
(1,1018)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:39:SER:HB2	15	0.3
(1,890)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HG3	17	0.29
(1,890)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HG3	17	0.29
(1,890)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HG3	17	0.29
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG2	14	0.29
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG2	17	0.29
(1,825)	1:A:31:ASP:HA	1:A:107:GLY:H	20	0.29
(1,600)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:174:TRP:HZ3	1	0.29
(1,520)	1:A:22:ARG:HA	1:A:22:ARG:HG2	1	0.29
(1,461)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:21:ALA:H	3	0.29
(1,461)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:21:ALA:H	4	0.29
(1,390)	1:A:14:ARG:HA	1:A:14:ARG:HG2	4	0.29
(1,390)	1:A:14:ARG:HA	1:A:14:ARG:HG2	6	0.29
(1,366)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HB2	4	0.29
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD11	8	0.29
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD12	8	0.29
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD13	8	0.29
(1,270)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:174:TRP:HA	15	0.29
(1,2599)	1:A:172:GLU:HA	1:A:172:GLU:HG2	17	0.29



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2529)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:166:ILE:H	5	0.29
(1,2486)	1:A:162:GLU:HA	1:A:162:GLU:HG2	13	0.29
(1,2480)	1:A:161:PRO:HG2	1:A:162:GLU:H	17	0.29
(1,2457)	1:A:158:GLU:HA	1:A:158:GLU:HG2	7	0.29
(1,2445)	1:A:156:GLU:HA	1:A:156:GLU:HG2	18	0.29
(1,2442)	1:A:155:GLU:HB2	1:A:156:GLU:H	19	0.29
(1,2417)	1:A:151:GLU:HA	1:A:151:GLU:HG2	5	0.29
(1,2417)	1:A:151:GLU:HA	1:A:151:GLU:HG2	8	0.29
(1,2417)	1:A:151:GLU:HA	1:A:151:GLU:HG2	9	0.29
(1,2386)	1:A:147:GLY:H	1:A:148:PRO:HD2	10	0.29
(1,2362)	1:A:141:ARG:HG2	1:A:142:GLY:H	13	0.29
(1,2358)	1:A:141:ARG:HA	1:A:141:ARG:HG2	15	0.29
(1,218)	1:A:7:THR:HG21	1:A:28:GLN:HE21	3	0.29
(1,218)	1:A:7:THR:HG22	1:A:28:GLN:HE21	3	0.29
(1,218)	1:A:7:THR:HG23	1:A:28:GLN:HE21	3	0.29
(1,2161)	1:A:126:GLY:HA2	1:A:174:TRP:HZ3	13	0.29
(1,2137)	1:A:124:GLU:HB2	1:A:125:VAL:H	4	0.29
(1,1856)	1:A:104:GLU:HA	1:A:104:GLU:HG2	12	0.29
(1,1851)	1:A:104:GLU:H	1:A:104:GLU:HB2	5	0.29
(1,1838)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:HD21	15	0.29
(1,1838)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:HD22	15	0.29
(1,1838)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:HD23	15	0.29
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HD21	6	0.29
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HD22	6	0.29
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HD23	6	0.29
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HD21	6	0.29
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HD22	6	0.29
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HD23	6	0.29
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HD21	6	0.29
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HD22	6	0.29
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HD23	6	0.29
(1,1712)	1:A:92:LYS:HB2	1:A:92:LYS:HD2	19	0.29
(1,1708)	1:A:92:LYS:HA	1:A:92:LYS:HD2	12	0.29
(1,1706)	1:A:92:LYS:H	1:A:92:LYS:HD2	5	0.29
(1,1621)	1:A:85:ILE:HD11	1:A:99:LEU:HB2	4	0.29
(1,1621)	1:A:85:ILE:HD12	1:A:99:LEU:HB2	4	0.29
(1,1621)	1:A:85:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HB2	4	0.29
(1,1586)	1:A:83:LEU:HD21	1:A:99:LEU:HB2	10	0.29
(1,1586)	1:A:83:LEU:HD22	1:A:99:LEU:HB2	10	0.29
(1,1586)	1:A:83:LEU:HD23	1:A:99:LEU:HB2	10	0.29
(1,1568)	1:A:82:ARG:HB2	1:A:82:ARG:HD2	13	0.29
(1,1556)	1:A:81:ARG:HB2	1:A:81:ARG:HD2	3	0.29



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1556)	1:A:81:ARG:HB2	1:A:81:ARG:HD2	5	0.29
(1,1406)	1:A:67:GLN:HA	1:A:67:GLN:HG2	13	0.29
(1,1318)	1:A:59:ARG:HB2	1:A:59:ARG:HD2	14	0.29
(1,1285)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HA	17	0.29
(1,1274)	1:A:55:LYS:HG2	1:A:55:LYS:HE2	2	0.29
(1,1243)	1:A:53:GLU:H	1:A:54:PRO:HD2	20	0.29
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD21	5	0.29
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD22	5	0.29
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD23	5	0.29
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE1	15	0.29
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE1	18	0.29
(1,1182)	1:A:50:TRP:HH2	1:A:136:LEU:HB2	13	0.29
(1,1165)	1:A:49:ARG:HB2	1:A:49:ARG:HD2	20	0.29
(1,1160)	1:A:49:ARG:HA	1:A:49:ARG:HD2	20	0.29
(1,1030)	1:A:40:ALA:H	1:A:46:ARG:HD2	8	0.29
(1,1018)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:39:SER:HB2	19	0.29
(1,895)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:HB2	14	0.28
(1,895)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:HB2	14	0.28
(1,895)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:HB2	14	0.28
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG2	3	0.28
(1,841)	1:A:32:ALA:HA	1:A:36:GLU:HB2	19	0.28
(1,814)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD11	1	0.28
(1,814)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD12	1	0.28
(1,814)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD13	1	0.28
(1,814)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD11	4	0.28
(1,814)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD12	4	0.28
(1,814)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD13	4	0.28
(1,776)	1:A:29:ARG:HG2	1:A:30:TYR:H	6	0.28
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD11	12	0.28
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD12	12	0.28
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD13	12	0.28
(1,766)	1:A:29:ARG:HE	1:A:104:GLU:HB2	1	0.28
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD11	20	0.28
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD12	20	0.28
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD13	20	0.28
(1,530)	1:A:22:ARG:HD2	1:A:23:SER:H	18	0.28
(1,530)	1:A:22:ARG:HD2	1:A:23:SER:H	19	0.28
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG21	17	0.28
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG22	17	0.28
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG23	17	0.28
(1,459)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:19:GLY:H	10	0.28
(1,458)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:18:ALA:H	18	0.28



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,431)	1:A:16:ILE:H	1:A:20:GLU:HB2	6	0.28
(1,431)	1:A:16:ILE:H	1:A:20:GLU:HB2	8	0.28
(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG21	11	0.28
(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG22	11	0.28
(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG23	11	0.28
(1,397)	1:A:14:ARG:HB3	1:A:16:ILE:HG21	9	0.28
(1,397)	1:A:14:ARG:HB3	1:A:16:ILE:HG22	9	0.28
(1,397)	1:A:14:ARG:HB3	1:A:16:ILE:HG23	9	0.28
(1,390)	1:A:14:ARG:HA	1:A:14:ARG:HG2	7	0.28
(1,381)	1:A:13:ARG:HB2	1:A:13:ARG:HD2	9	0.28
(1,381)	1:A:13:ARG:HB2	1:A:13:ARG:HD2	14	0.28
(1,381)	1:A:13:ARG:HB2	1:A:13:ARG:HD2	16	0.28
(1,367)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HD2	3	0.28
(1,2712)	1:A:181:GLY:H	1:A:181:GLY:HA2	12	0.28
(1,2685)	1:A:177:LEU:HD21	1:A:180:SER:HB2	8	0.28
(1,2685)	1:A:177:LEU:HD22	1:A:180:SER:HB2	8	0.28
(1,2685)	1:A:177:LEU:HD23	1:A:180:SER:HB2	8	0.28
(1,2599)	1:A:172:GLU:HA	1:A:172:GLU:HG2	10	0.28
(1,2594)	1:A:172:GLU:H	1:A:172:GLU:HG2	2	0.28
(1,2577)	1:A:169:GLU:HA	1:A:172:GLU:HB2	16	0.28
(1,2529)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:166:ILE:H	18	0.28
(1,2486)	1:A:162:GLU:HA	1:A:162:GLU:HG2	19	0.28
(1,2457)	1:A:158:GLU:HA	1:A:158:GLU:HG2	14	0.28
(1,2445)	1:A:156:GLU:HA	1:A:156:GLU:HG2	7	0.28
(1,2441)	1:A:155:GLU:HA	1:A:155:GLU:HG2	3	0.28
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB1	10	0.28
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB2	10	0.28
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB3	10	0.28
(1,2413)	1:A:150:PRO:HG2	1:A:152:ASP:H	2	0.28
(1,2383)	1:A:145:PRO:HB2	1:A:146:GLY:H	18	0.28
(1,2380)	1:A:144:LEU:HB2	1:A:145:PRO:HD2	15	0.28
(1,2359)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:141:ARG:HD2	1	0.28
(1,2359)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:141:ARG:HD2	19	0.28
(1,217)	1:A:7:THR:HG21	1:A:27:ARG:HB2	2	0.28
(1,217)	1:A:7:THR:HG22	1:A:27:ARG:HB2	2	0.28
(1,217)	1:A:7:THR:HG23	1:A:27:ARG:HB2	2	0.28
(1,2137)	1:A:124:GLU:HB2	1:A:125:VAL:H	19	0.28
(1,200)	1:A:5:GLN:HG2	1:A:6:ALA:H	8	0.28
(1,200)	1:A:5:GLN:HG2	1:A:6:ALA:H	15	0.28
(1,195)	1:A:5:GLN:HA	1:A:5:GLN:HG2	20	0.28
(1,1860)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:107:GLY:H	10	0.28
(1,1856)	1:A:104:GLU:HA	1:A:104:GLU:HG2	17	0.28



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HD21	14	0.28
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HD22	14	0.28
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HD23	14	0.28
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HD21	14	0.28
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HD22	14	0.28
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HD23	14	0.28
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HD21	14	0.28
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HD22	14	0.28
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HD23	14	0.28
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD11	11	0.28
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD12	11	0.28
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD13	11	0.28
(1,1717)	1:A:92:LYS:HG2	1:A:92:LYS:HE2	12	0.28
(1,1712)	1:A:92:LYS:HB2	1:A:92:LYS:HD2	15	0.28
(1,1689)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:121:MET:HE1	13	0.28
(1,1689)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:121:MET:HE2	13	0.28
(1,1689)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:121:MET:HE3	13	0.28
(1,1451)	1:A:71:SER:HB2	1:A:72:GLY:H	17	0.28
(1,1413)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:H	5	0.28
(1,1316)	1:A:59:ARG:H	1:A:74:ILE:HG12	14	0.28
(1,1243)	1:A:53:GLU:H	1:A:54:PRO:HD2	13	0.28
(1,1238)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:67:GLN:HG2	14	0.28
(1,1238)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:67:GLN:HG2	14	0.28
(1,1238)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:67:GLN:HG2	14	0.28
(1,1182)	1:A:50:TRP:HH2	1:A:136:LEU:HB2	5	0.28
(1,1165)	1:A:49:ARG:HB2	1:A:49:ARG:HD2	9	0.28
(1,1152)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HB2	9	0.28
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD11	1	0.28
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD12	1	0.28
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD13	1	0.28
(1,1017)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:38:TRP:HE1	15	0.28
(1,1014)	1:A:38:TRP:HZ2	1:A:79:PRO:HG2	20	0.28
(1,1001)	1:A:38:TRP:HE1	1:A:79:PRO:HG2	20	0.28
(1,939)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:37:VAL:H	18	0.27
(1,895)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:HB2	2	0.27
(1,895)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:HB2	2	0.27
(1,895)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:HB2	2	0.27
(1,841)	1:A:32:ALA:HA	1:A:36:GLU:HB2	6	0.27
(1,806)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HD11	15	0.27
(1,806)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HD12	15	0.27
(1,806)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HD13	15	0.27
(1,804)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:137:GLY:HA3	17	0.27



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

(1,801)		Atom-2	Model	Violation (Å)
	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	18	0.27
(1,600)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:174:TRP:HZ3	9	0.27
(1,551)	1:A:23:SER:HB3	1:A:113:GLU:HG2	6	0.27
(1,520)	1:A:22:ARG:HA	1:A:22:ARG:HG2	13	0.27
(1,461)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:21:ALA:H	5	0.27
(1,404)	1:A:14:ARG:HB2	1:A:14:ARG:HD2	16	0.27
(1,394)	1:A:14:ARG:HB2	1:A:16:ILE:HG21	1	0.27
(1,394)	1:A:14:ARG:HB2	1:A:16:ILE:HG22	1	0.27
(1,394)	1:A:14:ARG:HB2	1:A:16:ILE:HG23	1	0.27
(1,381)	1:A:13:ARG:HB2	1:A:13:ARG:HD2	7	0.27
(1,366)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HB2	1	0.27
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD11	2	0.27
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD12	2	0.27
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD13	2	0.27
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD11	7	0.27
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD12	7	0.27
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD13	7	0.27
(1,2562)	1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HB2	7	0.27
(1,2562)	1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HB2	9	0.27
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:169:GLU:HG2	20	0.27
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:169:GLU:HG2	20	0.27
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:169:GLU:HG2	20	0.27
(1,2531)	1:A:165:ARG:HG2	1:A:166:ILE:H	12	0.27
(1,2528)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:165:ARG:HD2	7	0.27
(1,2528)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:165:ARG:HD2	18	0.27
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD11	8	0.27
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD12	8	0.27
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD13	8	0.27
(1,2457)	1:A:158:GLU:HA	1:A:158:GLU:HG2	8	0.27
(1,2445)	1:A:156:GLU:HA	1:A:156:GLU:HG2	10	0.27
(1,2445)	1:A:156:GLU:HA	1:A:156:GLU:HG2	17	0.27
(1,241)	1:A:8:GLU:HG2	1:A:9:ARG:H	3	0.27
(1,240)	1:A:8:GLU:HG2	1:A:27:ARG:HB2	7	0.27
(1,2383)	1:A:145:PRO:HB2	1:A:146:GLY:H	1	0.27
(1,2383)	1:A:145:PRO:HB2	1:A:146:GLY:H	13	0.27
(1,2365)	1:A:143:ASP:H	1:A:143:ASP:HB2	1	0.27
(1,2364)	1:A:142:GLY:H	1:A:144:LEU:HB2	17	0.27
(1,2350)	1:A:140:ILE:HG21	1:A:141:ARG:HG2	18	0.27
(1,2350)	1:A:140:ILE:HG22	1:A:141:ARG:HG2	18	0.27
(1,2350)	1:A:140:ILE:HG23	1:A:141:ARG:HG2	18	0.27
(1,2345)	1:A:140:ILE:HB	1:A:141:ARG:H	14	0.27
(1,2302)	1:A:138:MET:HA	1:A:141:ARG:HB2	10	0.27



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,208)	1:A:7:THR:HA	1:A:28:GLN:HG2	13	0.27
(1,1851)	1:A:104:GLU:H	1:A:104:GLU:HB2	17	0.27
(1,1712)	1:A:92:LYS:HB2	1:A:92:LYS:HD2	2	0.27
(1,1712)	1:A:92:LYS:HB2	1:A:92:LYS:HD2	4	0.27
(1,1712)	1:A:92:LYS:HB2	1:A:92:LYS:HD2	8	0.27
(1,1712)	1:A:92:LYS:HB2	1:A:92:LYS:HD2	12	0.27
(1,1712)	1:A:92:LYS:HB2	1:A:92:LYS:HD2	13	0.27
(1,1708)	1:A:92:LYS:HA	1:A:92:LYS:HD2	8	0.27
(1,1685)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:H	14	0.27
(1,1507)	1:A:75:LEU:HD21	1:A:86:SER:HB2	14	0.27
(1,1507)	1:A:75:LEU:HD22	1:A:86:SER:HB2	14	0.27
(1,1507)	1:A:75:LEU:HD23	1:A:86:SER:HB2	14	0.27
(1,1274)	1:A:55:LYS:HG2	1:A:55:LYS:HE2	13	0.27
(1,1267)	1:A:55:LYS:HA	1:A:55:LYS:HG2	2	0.27
(1,1225)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:69:ASN:HB2	6	0.27
(1,1225)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:69:ASN:HB2	6	0.27
(1,1225)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:69:ASN:HB2	6	0.27
(1,1165)	1:A:49:ARG:HB2	1:A:49:ARG:HD2	13	0.27
(1,1122)	1:A:46:ARG:HG2	1:A:47:ILE:H	15	0.27
(1,1054)	1:A:41:CYS:H	1:A:99:LEU:HD11	7	0.27
(1,1054)	1:A:41:CYS:H	1:A:99:LEU:HD12	7	0.27
(1,1054)	1:A:41:CYS:H	1:A:99:LEU:HD13	7	0.27
(1,939)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:37:VAL:H	6	0.26
(1,895)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:HB2	8	0.26
(1,895)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:HB2	8	0.26
(1,895)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:HB2	8	0.26
(1,866)	1:A:33:PRO:HG2	1:A:34:VAL:H	7	0.26
(1,849)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:HB2	13	0.26
(1,849)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:HB2	13	0.26
(1,849)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:HB2	13	0.26
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	12	0.26
(1,776)	1:A:29:ARG:HG2	1:A:30:TYR:H	3	0.26
(1,750)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HE1	7	0.26
(1,750)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HE1	19	0.26
(1,738)	1:A:28:GLN:H	1:A:28:GLN:HG2	4	0.26
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD11	6	0.26
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD12	6	0.26
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD13	6	0.26
(1,600)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:174:TRP:HZ3	18	0.26
(1,551)	1:A:23:SER:HB3	1:A:113:GLU:HG2	14	0.26
(1,527)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:22:ARG:HD2	7	0.26
(1,527)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:22:ARG:HD2	10	0.26



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,520)	1:A:22:ARG:HA	1:A:22:ARG:HG2	10	0.26
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD11	3	0.26
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD12	3	0.26
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD13	3	0.26
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD11	15	0.26
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD12	15	0.26
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD13	15	0.26
(1,2712)	1:A:181:GLY:H	1:A:181:GLY:HA2	15	0.26
(1,2562)	1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HB2	6	0.26
(1,2562)	1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HB2	16	0.26
(1,2550)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:170:ARG:HG2	15	0.26
(1,2550)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:170:ARG:HG2	15	0.26
(1,2550)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:170:ARG:HG2	15	0.26
(1,2531)	1:A:165:ARG:HG2	1:A:166:ILE:H	9	0.26
(1,2505)	1:A:163:MET:HE1	1:A:167:SER:HB2	12	0.26
(1,2505)	1:A:163:MET:HE2	1:A:167:SER:HB2	12	0.26
(1,2505)	1:A:163:MET:HE3	1:A:167:SER:HB2	12	0.26
(1,2486)	1:A:162:GLU:HA	1:A:162:GLU:HG2	12	0.26
(1,2486)	1:A:162:GLU:HA	1:A:162:GLU:HG2	20	0.26
(1,2457)	1:A:158:GLU:HA	1:A:158:GLU:HG2	11	0.26
(1,2444)	1:A:156:GLU:H	1:A:156:GLU:HG2	16	0.26
(1,2421)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:H	11	0.26
(1,2418)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:H	10	0.26
(1,2417)	1:A:151:GLU:HA	1:A:151:GLU:HG2	7	0.26
(1,2402)	1:A:149:VAL:HB	1:A:152:ASP:H	15	0.26
(1,2380)	1:A:144:LEU:HB2	1:A:145:PRO:HD2	6	0.26
(1,2378)	1:A:144:LEU:HA	1:A:144:LEU:HD11	5	0.26
(1,2378)	1:A:144:LEU:HA	1:A:144:LEU:HD12	5	0.26
(1,2378)	1:A:144:LEU:HA	1:A:144:LEU:HD13	5	0.26
(1,2367)	1:A:143:ASP:H	1:A:144:LEU:HB2	2	0.26
(1,2362)	1:A:141:ARG:HG2	1:A:142:GLY:H	12	0.26
(1,2359)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:141:ARG:HD2	12	0.26
(1,2359)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:141:ARG:HD2	20	0.26
(1,2358)	1:A:141:ARG:HA	1:A:141:ARG:HG2	5	0.26
(1,229)	1:A:8:GLU:HA	1:A:8:GLU:HG2	5	0.26
(1,2137)	1:A:124:GLU:HB2	1:A:125:VAL:H	15	0.26
(1,2126)	1:A:123:VAL:HG21	1:A:179:HIS:HD2	1	0.26
(1,2126)	1:A:123:VAL:HG22	1:A:179:HIS:HD2	1	0.26
(1,2126)	1:A:123:VAL:HG23	1:A:179:HIS:HD2	1	0.26
(1,200)	1:A:5:GLN:HG2	1:A:6:ALA:H	14	0.26
(1,195)	1:A:5:GLN:HA	1:A:5:GLN:HG2	5	0.26
(1,1869)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:HD21	18	0.26



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1869)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:HD22	18	0.26
(1,1869)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:HD23	18	0.26
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD11	15	0.26
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD12	15	0.26
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD13	15	0.26
(1,1717)	1:A:92:LYS:HG2	1:A:92:LYS:HE2	17	0.26
(1,1712)	1:A:92:LYS:HB2	1:A:92:LYS:HD2	3	0.26
(1,1706)	1:A:92:LYS:H	1:A:92:LYS:HD2	3	0.26
(1,1703)	1:A:90:GLU:HG2	1:A:91:GLY:H	11	0.26
(1,1696)	1:A:90:GLU:HA	1:A:90:GLU:HG2	4	0.26
(1,1696)	1:A:90:GLU:HA	1:A:90:GLU:HG2	18	0.26
(1,1682)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:121:MET:HE1	12	0.26
(1,1682)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:121:MET:HE2	12	0.26
(1,1682)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:121:MET:HE3	12	0.26
(1,1530)	1:A:78:GLU:H	1:A:79:PRO:HB2	9	0.26
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD11	8	0.26
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD12	8	0.26
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD13	8	0.26
(1,1320)	1:A:59:ARG:HG2	1:A:62:GLY:HA2	10	0.26
(1,1274)	1:A:55:LYS:HG2	1:A:55:LYS:HE2	18	0.26
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:56:GLY:H	11	0.26
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:56:GLY:H	13	0.26
(1,1222)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:69:ASN:HA	6	0.26
(1,1222)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:69:ASN:HA	6	0.26
(1,1222)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:69:ASN:HA	6	0.26
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:68:GLY:HA2	19	0.26
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:68:GLY:HA2	19	0.26
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:68:GLY:HA2	19	0.26
(1,1165)	1:A:49:ARG:HB2	1:A:49:ARG:HD2	2	0.26
(1,1165)	1:A:49:ARG:HB2	1:A:49:ARG:HD2	7	0.26
(1,1151)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HA	16	0.26
(1,1017)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:38:TRP:HE1	20	0.26
(1,1014)	1:A:38:TRP:HZ2	1:A:79:PRO:HG2	1	0.26
(1,1014)	1:A:38:TRP:HZ2	1:A:79:PRO:HG2	19	0.26
(1,939)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:37:VAL:H	20	0.25
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG11	5	0.25
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG12	5	0.25
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG13	5	0.25
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG11	17	0.25
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG12	17	0.25
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG13	17	0.25
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD11	13	0.25



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD12	13	0.25
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD13	13	0.25
(1,635)	1:A:25:ILE:HG12	1:A:113:GLU:HA	2	0.25
(1,633)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:114:HIS:H	18	0.25
(1,633)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:114:HIS:H	18	0.25
(1,633)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:114:HIS:H	18	0.25
(1,527)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:22:ARG:HD2	8	0.25
(1,51)	1:A:51:PHE:H	1:A:47:ILE:O	10	0.25
(1,431)	1:A:16:ILE:H	1:A:20:GLU:HB2	5	0.25
(1,383)	1:A:13:ARG:HG2	1:A:14:ARG:HA	3	0.25
(1,367)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HD2	15	0.25
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD11	5	0.25
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD12	5	0.25
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD13	5	0.25
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD11	16	0.25
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD12	16	0.25
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD13	16	0.25
(1,2712)	1:A:181:GLY:H	1:A:181:GLY:HA2	6	0.25
(1,2712)	1:A:181:GLY:H	1:A:181:GLY:HA2	10	0.25
(1,2712)	1:A:181:GLY:H	1:A:181:GLY:HA2	19	0.25
(1,2594)	1:A:172:GLU:H	1:A:172:GLU:HG2	18	0.25
(1,2522)	1:A:165:ARG:HA	1:A:165:ARG:HG2	17	0.25
(1,2471)	1:A:160:SER:HB2	1:A:162:GLU:H	20	0.25
(1,2441)	1:A:155:GLU:HA	1:A:155:GLU:HG2	16	0.25
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB1	1:A:156:GLU:H	18	0.25
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB2	1:A:156:GLU:H	18	0.25
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB3	1:A:156:GLU:H	18	0.25
(1,2400)	1:A:149:VAL:HB	1:A:150:PRO:HD2	1	0.25
(1,2362)	1:A:141:ARG:HG2	1:A:142:GLY:H	20	0.25
(1,2330)	1:A:139:PHE:HB2	1:A:141:ARG:H	6	0.25
(1,196)	1:A:5:GLN:HA	1:A:6:ALA:H	14	0.25
(1,195)	1:A:5:GLN:HA	1:A:5:GLN:HG2	13	0.25
(1,1836)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:HB2	11	0.25
(1,1718)	1:A:92:LYS:HG2	1:A:93:PRO:HD2	10	0.25
(1,1712)	1:A:92:LYS:HB2	1:A:92:LYS:HD2	7	0.25
(1,1703)	1:A:90:GLU:HG2	1:A:91:GLY:H	10	0.25
(1,1672)	1:A:89:TYR:HA	1:A:89:TYR:HD1	7	0.25
(1,1649)	1:A:87:TRP:HE1	1:A:89:TYR:HE1	2	0.25
(1,1568)	1:A:82:ARG:HB2	1:A:82:ARG:HD2	4	0.25
(1,1556)	1:A:81:ARG:HB2	1:A:81:ARG:HD2	20	0.25
(1,1530)	1:A:78:GLU:H	1:A:79:PRO:HB2	18	0.25
(1,1517)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HD2	9	0.25



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1517)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HD2	20	0.25
(1,1495)	1:A:75:LEU:HB2	1:A:84:THR:HB	20	0.25
(1,1318)	1:A:59:ARG:HB2	1:A:59:ARG:HD2	1	0.25
(1,1284)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:58:LEU:HD21	20	0.25
(1,1284)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:58:LEU:HD22	20	0.25
(1,1284)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:58:LEU:HD23	20	0.25
(1,1274)	1:A:55:LYS:HG2	1:A:55:LYS:HE2	15	0.25
(1,1018)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:39:SER:HB2	6	0.25
(1,1017)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:38:TRP:HE1	2	0.25
(1,1017)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:38:TRP:HE1	6	0.25
(1,1017)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:38:TRP:HE1	10	0.25
(1,1017)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:38:TRP:HE1	18	0.25
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD11	11	0.25
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD12	11	0.25
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD13	11	0.25
(1,825)	1:A:31:ASP:HA	1:A:107:GLY:H	9	0.24
(1,814)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD11	19	0.24
(1,814)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD12	19	0.24
(1,814)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD13	19	0.24
(1,776)	1:A:29:ARG:HG2	1:A:30:TYR:H	19	0.24
(1,774)	1:A:29:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HB2	6	0.24
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD11	4	0.24
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD12	4	0.24
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD13	4	0.24
(1,747)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HB2	2	0.24
(1,496)	1:A:20:GLU:HG2	1:A:21:ALA:H	14	0.24
(1,399)	1:A:14:ARG:HE	1:A:15:THR:H	16	0.24
(1,399)	1:A:14:ARG:HE	1:A:15:THR:H	20	0.24
(1,390)	1:A:14:ARG:HA	1:A:14:ARG:HG2	9	0.24
(1,381)	1:A:13:ARG:HB2	1:A:13:ARG:HD2	6	0.24
(1,346)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:22:ARG:HG2	13	0.24
(1,346)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:22:ARG:HG2	13	0.24
(1,346)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:22:ARG:HG2	13	0.24
(1,270)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:174:TRP:HA	1	0.24
(1,270)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:174:TRP:HA	12	0.24
(1,2654)	1:A:176:ALA:H	1:A:177:LEU:HB2	5	0.24
(1,2560)	1:A:166:ILE:HG21	1:A:170:ARG:HD2	2	0.24
(1,2560)	1:A:166:ILE:HG22	1:A:170:ARG:HD2	2	0.24
(1,2560)	1:A:166:ILE:HG23	1:A:170:ARG:HD2	2	0.24
(1,2507)	1:A:164:MET:H	1:A:164:MET:HG2	2	0.24
(1,2486)	1:A:162:GLU:HA	1:A:162:GLU:HG2	16	0.24
(1,2475)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HB2	2	0.24



Continued from previous page...

Key	$rac{d\ from\ previous\ page}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2470)	1:A:160:SER:HB2	1:A:161:PRO:HD2	17	0.24
(1,2410) $(1,2418)$	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:H	8	0.24
(1,2410) $(1,2410)$	1:A:150:PRO:HB2	1:A:151:GLU:H	2	0.24
(1,2410) $(1,2410)$	1:A:150:PRO:HB2	1:A:151:GLU:H	18	0.24
(1,2375)	1:A:144:LEU:H	1:A:145:PRO:HD2	9	0.24
(1,2362)	1:A:141:ARG:HG2	1:A:142:GLY:H	1	0.24
(1,2362) $(1,2161)$	1:A:126:GLY:HA2	1:A:174:TRP:HZ3	15	0.24
(1,2101) $(1,208)$	1:A:7:THR:HA	1:A:28:GLN:HG2	4	0.24
(1,203) $(1,2047)$	1:A:120:GLN:HA	1:A:120:GLN:HE21	1	0.24
(1,2047) $(1,200)$	1:A:5:GLN:HG2	1:A:6:ALA:H	5	0.24
(1,260) $(1,1867)$	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:H	6	0.24
(1,1790)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:113:GLU:H	20	0.24
(1,1790) $(1,1790)$	1:A:99:LEU:HD12	1:A:113:GLU:H	20	0.24
(1,1790) $(1,1790)$	1:A:99:LEU:HD13	1:A:113:GLU:H	20	0.24
( ' /	1:A:95:SER:HB2	1:A:113:GLU:H 1:A:121:MET:HE1	12	0.24
(1,1730)	1:A:95:SER:HB2	1:A:121:MET:HE1 1:A:121:MET:HE2	12	0.24
$\begin{array}{ c c c }\hline (1,1730) \\ \hline (1,1730) \\ \hline \end{array}$	1:A:95:SER:HB2	1:A:121:MET:HE2 1:A:121:MET:HE3	12	0.24
· /	1:A:90:SER:HB2 1:A:92:LYS:HG2	1:A:121:ME1:HE3 1:A:93:PRO:HD2	6	0.24
(1,1718)	1:A:92:LYS:HB2	1:A:92:LYS:HD2	17	
(1,1712)	1:A:92:L15:HB2 1:A:87:TRP:HB2	1:A:95:SER:H	2	0.24
(1,1653)	1:A:87:1RF:HB2 1:A:82:ARG:HG2	1:A:99:5EK:H	13	0.24
(1,1570)	1:A:78:GLU:H	1:A:83:LEU:H 1:A:82:ARG:HG2	16	0.24
$\begin{array}{ c c }\hline (1,1534) \\ \hline (1,1518) \\ \hline \end{array}$	1:A:76:ARG:HB2	1:A:84:THR:H	5	0.24
( '	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA2		
(1,1414) $(1,1336)$	1:A:62:GLY:H	1:A:08:GLY:HA2 1:A:74:ILE:HD11	10 16	0.24
( '	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HD11 1:A:74:ILE:HD12	16	0.24
(1,1336)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HD12 1:A:74:ILE:HD13	16	0.24
(1,1336)	1:A:58:LEU:H	1:A:74:1LE:HD15 1:A:59:ARG:HG2		
(1,1299)			4	0.24
(1,1274)	1:A:55:LYS:HG2	1:A:55:LYS:HE2	8	0.24
(1,1243)	1:A:53:GLU:H	1:A:54:PRO:HD2	15	0.24
(1,1165)	1:A:49:ARG:HB2	1:A:49:ARG:HD2	14	0.24
(1,1122)	1:A:46:ARG:HG2	1:A:47:ILE:H	14	0.24
(1,1018)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:39:SER:HB2	20	0.24
(1,1017)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:38:TRP:HE1	5	0.24
(1,1017)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:38:TRP:HE1	8	0.24
(1,1017)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:38:TRP:HE1	9	0.24
(1,1017)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:38:TRP:HE1	11	0.24
(1,1017)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:38:TRP:HE1	12	0.24
(1,897)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:37:VAL:H	18	0.23
(1,897)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:37:VAL:H	18	0.23
(1,897)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:37:VAL:H	18	0.23
(1,895)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:HB2	Continue	0.23



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,895)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:HB2	1	0.23
(1,895)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:HB2	1	0.23
(1,814)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD11	11	0.23
(1,814)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD12	11	0.23
(1,814)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD13	11	0.23
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG11	8	0.23
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG12	8	0.23
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG13	8	0.23
(1,775)	1:A:29:ARG:HG2	1:A:29:ARG:HE	13	0.23
(1,766)	1:A:29:ARG:HE	1:A:104:GLU:HB2	20	0.23
(1,642)	1:A:25:ILE:HG21	1:A:113:GLU:HB2	2	0.23
(1,642)	1:A:25:ILE:HG22	1:A:113:GLU:HB2	2	0.23
(1,642)	1:A:25:ILE:HG23	1:A:113:GLU:HB2	2	0.23
(1,520)	1:A:22:ARG:HA	1:A:22:ARG:HG2	2	0.23
(1,51)	1:A:51:PHE:H	1:A:47:ILE:O	16	0.23
(1,51)	1:A:51:PHE:H	1:A:47:ILE:O	18	0.23
(1,446)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HG21	20	0.23
(1,446)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HG22	20	0.23
(1,446)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HG23	20	0.23
(1,446)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HG21	20	0.23
(1,446)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HG22	20	0.23
(1,446)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HG23	20	0.23
(1,446)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HG21	20	0.23
(1,446)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HG22	20	0.23
(1,446)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HG23	20	0.23
(1,431)	1:A:16:ILE:H	1:A:20:GLU:HB2	2	0.23
(1,431)	1:A:16:ILE:H	1:A:20:GLU:HB2	20	0.23
(1,427)	1:A:16:ILE:H	1:A:17:PRO:HD2	6	0.23
(1,427)	1:A:16:ILE:H	1:A:17:PRO:HD2	14	0.23
(1,423)	1:A:15:THR:HG21	1:A:20:GLU:HG2	9	0.23
(1,423)	1:A:15:THR:HG22	1:A:20:GLU:HG2	9	0.23
(1,423)	1:A:15:THR:HG23	1:A:20:GLU:HG2	9	0.23
(1,404)	1:A:14:ARG:HB2	1:A:14:ARG:HD2	17	0.23
(1,388)	1:A:14:ARG:H	1:A:22:ARG:HG2	13	0.23
(1,388)	1:A:14:ARG:H	1:A:22:ARG:HG2	19	0.23
(1,381)	1:A:13:ARG:HB2	1:A:13:ARG:HD2	11	0.23
(1,381)	1:A:13:ARG:HB2	1:A:13:ARG:HD2	13	0.23
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD11	5	0.23
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD12	5	0.23
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD13	5	0.23
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD11	16	0.23
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD12	16	0.23



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD13	16	0.23
(1,2562)	1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HB2	12	0.23
(1,2547)	1:A:166:ILE:HB	1:A:169:GLU:HG2	1	0.23
(1,2507)	1:A:164:MET:H	1:A:164:MET:HG2	6	0.23
(1,2486)	1:A:162:GLU:HA	1:A:162:GLU:HG2	15	0.23
(1,2430)	1:A:153:ALA:H	1:A:154:ALA:H	17	0.23
(1,2412)	1:A:150:PRO:HG2	1:A:151:GLU:H	7	0.23
(1,2412)	1:A:150:PRO:HG2	1:A:151:GLU:H	14	0.23
(1,2386)	1:A:147:GLY:H	1:A:148:PRO:HD2	4	0.23
(1,2386)	1:A:147:GLY:H	1:A:148:PRO:HD2	12	0.23
(1,2359)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:141:ARG:HD2	5	0.23
(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB1	11	0.23
(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB2	11	0.23
(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB3	11	0.23
(1,2137)	1:A:124:GLU:HB2	1:A:125:VAL:H	14	0.23
(1,200)	1:A:5:GLN:HG2	1:A:6:ALA:H	13	0.23
(1,1999)	1:A:116:THR:HG21	1:A:121:MET:HB2	6	0.23
(1,1999)	1:A:116:THR:HG22	1:A:121:MET:HB2	6	0.23
(1,1999)	1:A:116:THR:HG23	1:A:121:MET:HB2	6	0.23
(1,1867)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:H	20	0.23
(1,1790)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:113:GLU:H	1	0.23
(1,1790)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:113:GLU:H	1	0.23
(1,1790)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:113:GLU:H	1	0.23
(1,1790)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:113:GLU:H	6	0.23
(1,1790)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:113:GLU:H	6	0.23
(1,1790)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:113:GLU:H	6	0.23
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HG	19	0.23
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HG	19	0.23
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HG	19	0.23
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD11	20	0.23
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD12	20	0.23
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD13	20	0.23
(1,1718)	1:A:92:LYS:HG2	1:A:93:PRO:HD2	20	0.23
(1,1430)	1:A:70:ALA:HA	1:A:89:TYR:HE1	7	0.23
(1,1429)	1:A:70:ALA:HA	1:A:89:TYR:HD1	7	0.23
(1,1318)	1:A:59:ARG:HB2	1:A:59:ARG:HD2	16	0.23
(1,1318)	1:A:59:ARG:HB2	1:A:59:ARG:HD2	18	0.23
(1,1318)	1:A:59:ARG:HB2	1:A:59:ARG:HD2	19	0.23
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:56:GLY:H	12	0.23
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:66:LEU:HA	13	0.23
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:66:LEU:HA	13	0.23
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:66:LEU:HA	13	0.23



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1165)	1:A:49:ARG:HB2	1:A:49:ARG:HD2	16	0.23
(1,1153)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HG2	4	0.23
(1,1122)	1:A:46:ARG:HG2	1:A:47:ILE:H	3	0.23
(1,1122)	1:A:46:ARG:HG2	1:A:47:ILE:H	9	0.23
(1,1117)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:47:ILE:HG12	15	0.23
(1,1018)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:39:SER:HB2	7	0.23
(1,1017)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:38:TRP:HE1	4	0.23
(1,1017)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:38:TRP:HE1	14	0.23
(1,980)	1:A:38:TRP:H	1:A:39:SER:HB2	9	0.22
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG2	8	0.22
(1,841)	1:A:32:ALA:HA	1:A:36:GLU:HB2	1	0.22
(1,822)	1:A:31:ASP:H	1:A:31:ASP:HB2	19	0.22
(1,814)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD11	13	0.22
(1,814)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD12	13	0.22
(1,814)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD13	13	0.22
(1,767)	1:A:29:ARG:HE	1:A:104:GLU:HG2	2	0.22
(1,749)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HD1	2	0.22
(1,61)	1:A:64:PHE:H	1:A:72:GLY:O	14	0.22
(1,520)	1:A:22:ARG:HA	1:A:22:ARG:HG2	17	0.22
(1,516)	1:A:22:ARG:H	1:A:22:ARG:HD2	8	0.22
(1,51)	1:A:51:PHE:H	1:A:47:ILE:O	15	0.22
(1,461)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:21:ALA:H	8	0.22
(1,456)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:95:SER:HB2	5	0.22
(1,456)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:95:SER:HB2	5	0.22
(1,456)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:95:SER:HB2	5	0.22
(1,427)	1:A:16:ILE:H	1:A:17:PRO:HD2	5	0.22
(1,331)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:180:SER:H	1	0.22
(1,331)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:180:SER:H	1	0.22
(1,331)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:180:SER:H	1	0.22
(1,29)	1:A:29:ARG:H	1:A:6:ALA:O	18	0.22
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD11	15	0.22
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD12	15	0.22
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD13	15	0.22
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD11	20	0.22
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD12	20	0.22
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD13	20	0.22
(1,2712)	1:A:181:GLY:H	1:A:181:GLY:HA2	17	0.22
(1,271)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:174:TRP:HE1	10	0.22
(1,2685)	1:A:177:LEU:HD21	1:A:180:SER:HB2	12	0.22
(1,2685)	1:A:177:LEU:HD22	1:A:180:SER:HB2	12	0.22
(1,2685)	1:A:177:LEU:HD23	1:A:180:SER:HB2	12	0.22
(1,2557)	1:A:166:ILE:HG21	1:A:167:SER:HB2	1	0.22



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2557)	1:A:166:ILE:HG22	1:A:167:SER:HB2	1	0.22
(1,2557)	1:A:166:ILE:HG23	1:A:167:SER:HB2	1	0.22
(1,2528)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:165:ARG:HD2	8	0.22
(1,2518)	1:A:164:MET:HG2	1:A:165:ARG:H	6	0.22
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB1	1:A:155:GLU:H	8	0.22
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB2	1:A:155:GLU:H	8	0.22
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB3	1:A:155:GLU:H	8	0.22
(1,2416)	1:A:151:GLU:H	1:A:153:ALA:HB1	16	0.22
(1,2416)	1:A:151:GLU:H	1:A:153:ALA:HB2	16	0.22
(1,2416)	1:A:151:GLU:H	1:A:153:ALA:HB3	16	0.22
(1,2392)	1:A:148:PRO:HD2	1:A:149:VAL:H	5	0.22
(1,232)	1:A:8:GLU:HB2	1:A:27:ARG:H	20	0.22
(1,2048)	1:A:120:GLN:HA	1:A:120:GLN:HG2	19	0.22
(1,2047)	1:A:120:GLN:HA	1:A:120:GLN:HE21	13	0.22
(1,2036)	1:A:119:GLU:HG3	1:A:122:LEU:HD11	15	0.22
(1,2036)	1:A:119:GLU:HG3	1:A:122:LEU:HD12	15	0.22
(1,2036)	1:A:119:GLU:HG3	1:A:122:LEU:HD13	15	0.22
(1,1999)	1:A:116:THR:HG21	1:A:121:MET:HB2	10	0.22
(1,1999)	1:A:116:THR:HG22	1:A:121:MET:HB2	10	0.22
(1,1999)	1:A:116:THR:HG23	1:A:121:MET:HB2	10	0.22
(1,193)	1:A:5:GLN:H	1:A:5:GLN:HB2	17	0.22
(1,1867)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:H	1	0.22
(1,1860)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:107:GLY:H	18	0.22
(1,1856)	1:A:104:GLU:HA	1:A:104:GLU:HG2	5	0.22
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:112:LEU:H	17	0.22
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:112:LEU:H	17	0.22
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:112:LEU:H	17	0.22
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HG	6	0.22
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HG	6	0.22
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HG	6	0.22
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD11	13	0.22
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD12	13	0.22
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD13	13	0.22
(1,1712)	1:A:92:LYS:HB2	1:A:92:LYS:HD2	14	0.22
(1,1709)	1:A:92:LYS:HA	1:A:92:LYS:HE2	1	0.22
(1,1610)	1:A:85:ILE:H	1:A:98:GLU:HB2	15	0.22
(1,1568)	1:A:82:ARG:HB2	1:A:82:ARG:HD2	11	0.22
(1,1531)	1:A:78:GLU:H	1:A:79:PRO:HD2	4	0.22
(1,1517)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HD2	5	0.22
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	2	0.22
(1,1406)	1:A:67:GLN:HA	1:A:67:GLN:HG2	15	0.22
(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	12	0.22



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	18	0.22
(1,1286)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HB2	5	0.22
(1,1274)	1:A:55:LYS:HG2	1:A:55:LYS:HE2	9	0.22
(1,1243)	1:A:53:GLU:H	1:A:54:PRO:HD2	1	0.22
(1,1243)	1:A:53:GLU:H	1:A:54:PRO:HD2	5	0.22
(1,1236)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:67:GLN:H	14	0.22
(1,1236)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:67:GLN:H	14	0.22
(1,1236)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:67:GLN:H	14	0.22
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:66:LEU:HA	16	0.22
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:66:LEU:HA	16	0.22
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:66:LEU:HA	16	0.22
(1,1205)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:52:ILE:H	19	0.22
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE1	9	0.22
(1,1165)	1:A:49:ARG:HB2	1:A:49:ARG:HD2	5	0.22
(1,1017)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:38:TRP:HE1	7	0.22
(1,1017)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:38:TRP:HE1	16	0.22
(1,1017)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:38:TRP:HE1	19	0.22
(1,996)	1:A:38:TRP:HD1	1:A:80:PRO:HB2	10	0.21
(1,841)	1:A:32:ALA:HA	1:A:36:GLU:HB2	13	0.21
(1,837)	1:A:32:ALA:H	1:A:33:PRO:HD2	7	0.21
(1,825)	1:A:31:ASP:HA	1:A:107:GLY:H	8	0.21
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG21	16	0.21
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG22	16	0.21
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG23	16	0.21
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG11	3	0.21
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG12	3	0.21
(1,809)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG13	3	0.21
(1,776)	1:A:29:ARG:HG2	1:A:30:TYR:H	9	0.21
(1,733)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:111:GLU:HA	13	0.21
(1,706)	1:A:26:ILE:HG21	1:A:28:GLN:HG2	11	0.21
(1,706)	1:A:26:ILE:HG22	1:A:28:GLN:HG2	11	0.21
(1,706)	1:A:26:ILE:HG23	1:A:28:GLN:HG2	11	0.21
(1,527)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:22:ARG:HD2	9	0.21
(1,527)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:22:ARG:HD2	16	0.21
(1,51)	1:A:51:PHE:H	1:A:47:ILE:O	12	0.21
(1,461)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:21:ALA:H	13	0.21
(1,427)	1:A:16:ILE:H	1:A:17:PRO:HD2	15	0.21
(1,427)	1:A:16:ILE:H	1:A:17:PRO:HD2	19	0.21
(1,372)	1:A:13:ARG:HA	1:A:13:ARG:HD3	19	0.21
(1,366)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HB2	8	0.21
(1,322)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:25:ILE:HD11	18	0.21
(1,322)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:25:ILE:HD12	18	0.21



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,322)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:25:ILE:HD13	18	0.21
(1,29)	1:A:29:ARG:H	1:A:6:ALA:O	20	0.21
(1,2712)	1:A:181:GLY:H	1:A:181:GLY:HA2	14	0.21
(1,2654)	1:A:176:ALA:H	1:A:177:LEU:HB2	3	0.21
(1,2594)	1:A:172:GLU:H	1:A:172:GLU:HG2	15	0.21
(1,2571)	1:A:168:GLN:HB2	1:A:169:GLU:H	17	0.21
(1,2547)	1:A:166:ILE:HB	1:A:169:GLU:HG2	8	0.21
(1,2512)	1:A:164:MET:HB2	1:A:167:SER:H	9	0.21
(1,2492)	1:A:163:MET:H	1:A:164:MET:HG2	6	0.21
(1,2486)	1:A:162:GLU:HA	1:A:162:GLU:HG2	6	0.21
(1,2470)	1:A:160:SER:HB2	1:A:161:PRO:HD2	13	0.21
(1,2441)	1:A:155:GLU:HA	1:A:155:GLU:HG2	14	0.21
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB1	1:A:154:ALA:H	14	0.21
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB2	1:A:154:ALA:H	14	0.21
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB3	1:A:154:ALA:H	14	0.21
(1,2414)	1:A:151:GLU:H	1:A:151:GLU:HG2	6	0.21
(1,2413)	1:A:150:PRO:HG2	1:A:152:ASP:H	18	0.21
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:150:PRO:HD2	14	0.21
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:150:PRO:HD2	14	0.21
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:150:PRO:HD2	14	0.21
(1,2392)	1:A:148:PRO:HD2	1:A:149:VAL:H	13	0.21
(1,2362)	1:A:141:ARG:HG2	1:A:142:GLY:H	19	0.21
(1,2359)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:141:ARG:HD2	6	0.21
(1,2359)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:141:ARG:HD2	7	0.21
(1,2323)	1:A:139:PHE:HA	1:A:144:LEU:HB3	8	0.21
(1,2139)	1:A:124:GLU:HG2	1:A:125:VAL:HA	7	0.21
(1,1848)	1:A:103:GLU:HG3	1:A:104:GLU:H	5	0.21
(1,1836)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:HB2	17	0.21
(1,179)	1:A:173:ALA:H	1:A:169:GLU:O	5	0.21
(1,1712)	1:A:92:LYS:HB2	1:A:92:LYS:HD2	16	0.21
(1,1705)	1:A:92:LYS:H	1:A:92:LYS:HB2	12	0.21
(1,1703)	1:A:90:GLU:HG2	1:A:91:GLY:H	20	0.21
(1,1691)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HE2	12	0.21
(1,1601)	1:A:84:THR:HG21	1:A:98:GLU:HB2	16	0.21
(1,1601)	1:A:84:THR:HG22	1:A:98:GLU:HB2	16	0.21
(1,1601)	1:A:84:THR:HG23	1:A:98:GLU:HB2	16	0.21
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	9	0.21
(1,1406)	1:A:67:GLN:HA	1:A:67:GLN:HG2	5	0.21
(1,1406)	1:A:67:GLN:HA	1:A:67:GLN:HG2	19	0.21
(1,1403)	1:A:67:GLN:H	1:A:67:GLN:HB2	14	0.21
(1,1327)	1:A:60:GLU:HG2	1:A:61:GLY:H	15	0.21
(1,1318)	1:A:59:ARG:HB2	1:A:59:ARG:HD2	3	0.21



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1318)	1:A:59:ARG:HB2	1:A:59:ARG:HD2	15	0.21
(1,1274)	1:A:55:LYS:HG2	1:A:55:LYS:HE2	11	0.21
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:56:GLY:H	14	0.21
(1,1267)	1:A:55:LYS:HA	1:A:55:LYS:HG2	3	0.21
(1,1261)	1:A:55:LYS:H	1:A:64:PHE:HB2	5	0.21
(1,1243)	1:A:53:GLU:H	1:A:54:PRO:HD2	10	0.21
(1,1167)	1:A:49:ARG:HG2	1:A:139:PHE:HZ	12	0.21
(1,1122)	1:A:46:ARG:HG2	1:A:47:ILE:H	6	0.21
(1,1122)	1:A:46:ARG:HG2	1:A:47:ILE:H	18	0.21
(1,1104)	1:A:46:ARG:H	1:A:47:ILE:HG12	6	0.21
(1,1054)	1:A:41:CYS:H	1:A:99:LEU:HD11	18	0.21
(1,1054)	1:A:41:CYS:H	1:A:99:LEU:HD12	18	0.21
(1,1054)	1:A:41:CYS:H	1:A:99:LEU:HD13	18	0.21
(1,1017)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:38:TRP:HE1	1	0.21
(1,1017)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:38:TRP:HE1	3	0.21
(1,1017)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:38:TRP:HE1	13	0.21
(1,1017)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:38:TRP:HE1	17	0.21
(1,1014)	1:A:38:TRP:HZ2	1:A:79:PRO:HG2	6	0.21
(1,996)	1:A:38:TRP:HD1	1:A:80:PRO:HB2	15	0.2
(1,929)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:39:SER:H	7	0.2
(1,929)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:39:SER:H	18	0.2
(1,906)	1:A:34:VAL:HG21	1:A:102:SER:HA	14	0.2
(1,906)	1:A:34:VAL:HG22	1:A:102:SER:HA	14	0.2
(1,906)	1:A:34:VAL:HG23	1:A:102:SER:HA	14	0.2
(1,897)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:37:VAL:H	15	0.2
(1,897)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:37:VAL:H	15	0.2
(1,897)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:37:VAL:H	15	0.2
(1,888)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HA	3	0.2
(1,888)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HA	3	0.2
(1,888)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HA	3	0.2
(1,804)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:137:GLY:HA3	5	0.2
(1,804)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:137:GLY:HA3	9	0.2
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD11	12	0.2
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD12	12	0.2
(1,795)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:101:LEU:HD13	12	0.2
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD21	14	0.2
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD22	14	0.2
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD23	14	0.2
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD11	12	0.2
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD12	12	0.2
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD13	12	0.2
(1,603)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:114:HIS:HB2	Continue	0.2



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

(1,603) 1:A:24:ILE:HG22 1:A:114:HIS:HB2 2 0.2 (1,527) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:12:ARG:HD2 17 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:16:THR:HG21 2 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG21 2 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG23 2 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG23 2 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG23 4 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG21 4 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG22 4 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG22 4 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG23 4 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG23 4 0.2 (1,520) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG23 4 0.2 (1,520) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG23 4 0.2 (1,440) 1:A:16:ILE:HG12 1:A:16:ILE:HG2 19 0.2 (1,449) 1:A:16:ILE:HG12 1:A:19:GLY:H 11 0.2 (1,440) 1:A:16:ILE:HG12 1:A:19:GLY:H 11 0.2 (1,408) 1:A:14:ARG:HD2 1:A:16:ILE:HG21 9 0.2 (1,408) 1:A:14:ARG:HD2 1:A:16:ILE:HG22 9 0.2 (1,408) 1:A:14:ARG:HD2 1:A:16:ILE:HG23 9 0.2 (1,381) 1:A:13:ARG:HB2 1:A:13:ARG:HB2 10 0.2 (1,386) 1:A:13:ARG:HB2 1:A:13:ARG:HB2 10 0.2 (1,386) 1:A:13:ARG:HB2 1:A:13:ARG:HB2 10 0.2 (1,366) 1:A:13:ARG:HB 1:A:13:ARG:HB2 10 0.2 (1,250) 1:A:16:IA:HA 1:A:17:HB3:HB3 16 0.2 (1,250) 1:A:16:ARG:HG2 1:A:16:ILE:H 2 0.2 (1,2531) 1:A:16:ARG:HG2 1:A:16:ILE:H 2 0.2 (1,2532) 1:A:16:ARG:HG2 1:A:16:ILE:H 4 0.2 (1,2533) 1:A:16:ARG:HG2 1:A:16:ILE:H 2 0.2 (1,2531) 1:A:16:ARG:HG2 1:A:16:ILE:H 19 0.2 (1,2532) 1:A:16:ARG:HG2 1:A:16:ILE:H 4 0.2 (1,2533) 1:A:16:ARG:HG2 1:A:16:ILE:H 4 0.2 (1,2531) 1:A:16:ARG:HG2 1:A:16:ILE:H 4 0.2 (1,2532) 1:A:16:ARG:HG2 1:A:16:ILE:H 4 0.2 (1,2533) 1:A:16:ARG:HG2 1:A:16:ILE:H 4 0.2 (1,2533) 1:A:16:ARG:HG2 1:A:16:ILE:H 4 0.2 (1,2331) 1:A:16:ARG:HG2 1:A:16:ILE:H 4 0.2 (1,2332) 1:A:13:ARG:HB2 1:A:16:IRE:H 4 0.2 (1,2433) 1:A:13:ARG:HB2 1:A:16:IRE:H 4 0.2 (1,2433) 1:A:13:ARG:HB2 1:A:16:IRE:H 4 0.2 (1,2233) 1:A:13:IMET:HG2 1:A:16:IRE:HB2 6 0.2 (1,2230	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,527) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:16:THR:HG21 2 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG21 2 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG22 2 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG23 2 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG23 2 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG21 4 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG22 4 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG22 4 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG23 4 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG23 4 0.2 (1,520) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:16:THR:HG23 4 0.2 (1,493) 1:A:20:GLU:H 1:A:20:GLU:HB2 9 0.2 (1,445) 1:A:16:ILE:HG12 1:A:21:ALA:H 2 0.2 (1,459) 1:A:16:ILE:HG12 1:A:19:GLY:H 11 0.2 (1,408) 1:A:14:ARG:HD2 1:A:16:ILE:HG21 9 0.2 (1,408) 1:A:14:ARG:HD2 1:A:16:ILE:HG22 9 0.2 (1,408) 1:A:14:ARG:HD2 1:A:16:ILE:HG22 9 0.2 (1,381) 1:A:13:ARG:HB2 1:A:13:ARG:HB2 10 0.2 (1,366) 1:A:13:ARG:HB2 1:A:13:ARG:HB2 10 0.2 (1,366) 1:A:13:ARG:HB 1:A:13:ARG:HB2 10 0.2 (1,366) 1:A:13:ARG:HB 1:A:13:ARG:HB2 17 0.2 (1,2712) 1:A:181:GLY:H 1:A:181:GLY:H 2 3 0.2 (1,253) 1:A:16:AB:A:HA 1:A:179:HIS:HB3 16 0.2 (1,253) 1:A:16:AB:A:HA 1:A:179:HIS:HB3 16 0.2 (1,253) 1:A:16:AB:A:HA 1:A:179:HIS:HB3 16 0.2 (1,253) 1:A:16:AB:A:HB 1:A:13:ARG:HB2 1:A:16:ILE:H 2 0.2 (1,2531) 1:A:16:AB:AB:HB 1:A:16:ILE:H 4 0.2 (1,2531) 1:A:16:AB:AB:HB 1:A:16:ILE:H 4 0.2 (1,2532) 1:A:16:AB:AB:HB 1:A:15:AB:AB:HB 1:A:15:AB:AB:HB 1 0.2 (1,2532) 1:A:16:AB:AB:HB 1 1:A:15:AB:AB:HB 1 0.2 (1,2532) 1:A:16:AB:AB:HB 1 1:A:16:ILE:H 4 0.2 (1,2432) 1:A:16:AB:AB:HB 1 1:A:15:AB:AB:HB 1 0.2 (1,2532) 1:A:16:AB:AB:HB 1 1:A:16:AB:HB 1 0.2 (1,2332) 1:A:13:AB:HB 1 1:A:15:AB:AB:HB 1 0.2 (1,2432) 1:A:13:AB:AB:HB 1 1:A:15:AB:AB:HB 1 0.2 (1,2432) 1:A:13:	(1,603)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:114:HIS:HB2	2	0.2
(1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG21 2 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG22 2 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG23 2 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG23 2 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG21 4 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG22 4 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG22 4 0.2 (1,520) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG23 4 0.2 (1,520) 1:A:22:ARG:HA 1:A:22:ARG:HG2 19 0.2 (1,493) 1:A:20:GLU:H 1:A:20:GLU:HB2 9 0.2 (1,493) 1:A:16:ILE:HG12 1:A:19:GLY:H 11 0.2 (1,459) 1:A:16:ILE:HG12 1:A:19:GLY:H 11 0.2 (1,408) 1:A:14:ARG:HD2 1:A:16:ILE:HG21 9 0.2 (1,408) 1:A:14:ARG:HD2 1:A:16:ILE:HG22 9 0.2 (1,408) 1:A:14:ARG:HD2 1:A:16:ILE:HG23 9 0.2 (1,366) 1:A:13:ARG:HD2 1:A:16:ILE:HG23 9 0.2 (1,365) 1:A:16:ARG:HD2 1:A:16:ILE:HG23 9 0.2 (1,2659) 1:A:16:ARG:HD2 1:A:16:ILE:HG23 9 0.2 (1,2659) 1:A:16:ARG:HD2 1:A:16:ILE:HG24 10 0.2 (1,2531) 1:A:16:ARG:HD2 1:A:16:ILE:H 10 0.2 (1,2531) 1:A:16:ARG:HD2 1:A:16:ILE:H 10 0.2 (1,2432) 1:A:15:ALA:HB1 1:A:15:ALA:HB1 1.A:15:ALA:HB1 1.A:15:ALA:HB1 1.A:15:ALA:HB1 1.A:15:ALA:HB1 1.A:15:ALA:HB2 1.A:16:ILE:HG2 1.A:13:IMET:HG2 1.A:13:ALA:HB2 1.A:16:ILE:HG2 1.A:13:IMET:HG2 1.A:	(1,603)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:114:HIS:HB2	2	0.2
(1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG22 2 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG23 2 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG21 4 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG21 4 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG22 4 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG23 4 0.2 (1,520) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG23 4 0.2 (1,520) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG23 4 0.2 (1,520) 1:A:20:ARG:HB4 1:A:20:GLU:HB2 9 0.2 (1,493) 1:A:16:ILE:HG12 1:A:16:THR:HG23 9 0.2 (1,440) 1:A:16:ILE:HG12 1:A:19:GLY:HB2 9 0.2 (1,459) 1:A:16:ILE:HG12 1:A:19:GLY:H 11 0.2 (1,459) 1:A:16:ILE:HG12 1:A:16:ILE:HG21 9 0.2 (1,408) 1:A:14:ARG:HD2 1:A:16:ILE:HG21 9 0.2 (1,408) 1:A:14:ARG:HD2 1:A:16:ILE:HG22 9 0.2 (1,408) 1:A:14:ARG:HD2 1:A:16:ILE:HG23 9 0.2 (1,366) 1:A:13:ARG:HB2 1:A:13:ARG:HB2 10 0.2 (1,366) 1:A:13:ARG:HB2 1:A:13:ARG:HB2 10 0.2 (1,366) 1:A:13:ARG:HB2 1:A:13:ARG:HB2 10 0.2 (1,366) 1:A:13:ARG:HB2 1:A:13:ARG:HB2 17 0.2 (1,250) 1:A:16:ILE:HG21 10 0.2 (1,2659) 1:A:16:ILE:HG21 11 A:18:IGLY:H 1:A:18:IGLY:HA2 3 0.2 (1,255) 1:A:16:ARG:HB2 1:A:13:ARG:HB2 17 0.2 (1,255) 1:A:16:ARG:HB2 1:A:13:ARG:HB2 10 0.2 (1,2531) 1:A:16:ARG:HB2 1:A:16:ILE:H 2 0.2 (1,2531) 1:A:16:ARG:HB2 1:A:16:ILE:H 2 0.2 (1,2531) 1:A:16:ARG:HB2 1:A:16:ILE:H 4 0.2 (1,2529) 1:A:16:ARG:HB2 1:A:16:ILE:H 4 0.2 (1,2432) 1:A:15:ALA:HB3 1:A:15:ALA:HB 11.A:15:ALA:HB 11.A:15	(1,527)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:22:ARG:HD2	17	0.2
(1,523)         1:A:22:ARG:HB2         1:A:116:THR:HG21         4         0.2           (1,523)         1:A:22:ARG:HB2         1:A:116:THR:HG21         4         0.2           (1,523)         1:A:22:ARG:HB2         1:A:116:THR:HG22         4         0.2           (1,523)         1:A:22:ARG:HB2         1:A:116:THR:HG23         4         0.2           (1,520)         1:A:22:ARG:HA         1:A:22:ARG:HG2         19         0.2           (1,493)         1:A:20:GLU:H         1:A:22:ARG:HB2         9         0.2           (1,461)         1:A:16:ILE:HG12         1:A:21:ALA:H         2         0.2           (1,461)         1:A:16:ILE:HG12         1:A:16:ILE:HG21         9         0.2           (1,459)         1:A:16:ILE:HG12         1:A:16:ILE:HG21         9         0.2           (1,408)         1:A:14:ARG:HD2         1:A:16:ILE:HG22         9         0.2           (1,408)         1:A:14:ARG:HD2         1:A:16:ILE:HG23         9         0.2           (1,408)         1:A:14:ARG:HD2         1:A:16:ILE:HG23         9         0.2           (1,408)         1:A:13:ARG:HD2         1:A:16:ILE:HG23         9         0.2           (1,381)         1:A:13:ARG:HD2         1:A:16:ILE:HG23	(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG21	2	0.2
(1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG21 4 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG22 4 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG23 4 0.2 (1,520) 1:A:22:ARG:HB 1:A:116:THR:HG23 4 0.2 (1,520) 1:A:22:ARG:HA 1:A:22:ARG:HG2 19 0.2 (1,493) 1:A:20:GLU:H 1:A:20:GLU:HB2 9 0.2 (1,4461) 1:A:16:ILE:HG12 1:A:21:ALA:H 2 0.2 (1,459) 1:A:16:ILE:HG12 1:A:19:GLY:H 11 0.2 (1,408) 1:A:14:ARG:HD2 1:A:16:ILE:HG21 9 0.2 (1,408) 1:A:14:ARG:HD2 1:A:16:ILE:HG22 9 0.2 (1,408) 1:A:14:ARG:HD2 1:A:16:ILE:HG23 9 0.2 (1,381) 1:A:13:ARG:HB2 1:A:13:ARG:HD2 1:A:16:ILE:HG23 9 0.2 (1,381) 1:A:13:ARG:HB2 1:A:13:ARG:HB2 1:A:13:ARG:HB2 (1,366) 1:A:13:ARG:HB 1:A:13:ARG:HB2 1:A:13:ARG:HB2 10 0.2 (1,366) 1:A:13:ARG:HB 1:A:13:ARG:HB2 17 0.2 (1,250) 1:A:16:ILE:HG23 10 0.2 (1,253) 1:A:16:ILE:HG24 11 0.2 (1,254) 1:A:16:ILE:HG25 11 0.2 (1,254) 1:A:16:ILE:HG24 11 0.2 (1,243) 1:A:15:IAE:HG24 11 A:IAE:HG24 11 0.2 (1,243) 1:A:15:IAE:HG24 11 A:IAE:HG24 11 0.2 (1,243) 1:A:13:IAE:HG24 11 A:IAE:HG25 I1 0.2 (1,243) 1:A:13:IAE:HG24 11 A:IAE:HG25 I1 0.2 (1,243) 1:A	(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG22	2	0.2
(1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG22 4 0.2 (1,523) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG23 4 0.2 (1,520) 1:A:22:ARG:HB2 1:A:116:THR:HG23 4 0.2 (1,520) 1:A:22:ARG:HA 1:A:22:ARG:HG2 19 0.2 (1,433) 1:A:16:ILE:HG12 1:A:21:ALA:H 2 0.2 (1,4461) 1:A:16:ILE:HG12 1:A:21:ALA:H 2 0.2 (1,445) 1:A:16:ILE:HG12 1:A:19:GLY:H 11 0.2 (1,459) 1:A:16:ILE:HG12 1:A:16:ILE:HG21 9 0.2 (1,408) 1:A:14:ARG:HD2 1:A:16:ILE:HG21 9 0.2 (1,408) 1:A:14:ARG:HD2 1:A:16:ILE:HG22 9 0.2 (1,408) 1:A:13:ARG:HD2 1:A:16:ILE:HG23 9 0.2 (1,366) 1:A:13:ARG:HB2 1:A:13:ARG:HD2 10 0.2 (1,366) 1:A:13:ARG:HB2 1:A:13:ARG:HB2 10 0.2 (1,366) 1:A:13:ARG:H 1:A:13:ARG:HB2 17 0.2 (1,366) 1:A:13:ARG:H 1:A:13:ARG:HB2 17 0.2 (1,259) 1:A:16:ALA:HA 1:A:179:HIS:HB3 16 0.2 (1,255) 1:A:19:ARG:HE 1:A:130:GLU:HG2 16 0.2 (1,2531) 1:A:16:ARG:HG2 1:A:166:ILE:H 2 0.2 (1,2531) 1:A:16:ARG:HG2 1:A:166:ILE:H 4 0.2 (1,2531) 1:A:16:ARG:HG2 1:A:166:ILE:H 4 0.2 (1,2528) 1:A:16:ARG:HB2 1:A:16:ILE:H 4 0.2 (1,2528) 1:A:16:ARG:HB2 1:A:16:ILE:H 4 0.2 (1,2528) 1:A:16:ARG:HB2 1:A:16:ARG:HD2 1:A:16:ARG:HB2 1:A:16:ARG:HD2 2 0.2 (1,2507) 1:A:16:ARG:HB2 1:A:16:ARG:HD2 2 0.2 (1,2432) 1:A:16:ARG:HB2 1:A:16:ARG:HD2 1:A:16:AR	(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG23	2	0.2
(1,523)         1:A:22:ARG:HB2         1:A:116:THR:HG23         4         0.2           (1,520)         1:A:22:ARG:HA         1:A:22:ARG:HG2         19         0.2           (1,493)         1:A:20:GLU:H         1:A:20:GLU:HB2         9         0.2           (1,461)         1:A:16:ILE:HG12         1:A:21:ALA:H         2         0.2           (1,459)         1:A:16:ILE:HG12         1:A:19:GLY:H         11         0.2           (1,408)         1:A:14:ARG:HD2         1:A:16:ILE:HG21         9         0.2           (1,408)         1:A:14:ARG:HD2         1:A:16:ILE:HG22         9         0.2           (1,408)         1:A:13:ARG:HD2         1:A:16:ILE:HG22         9         0.2           (1,408)         1:A:13:ARG:HD2         1:A:16:ILE:HG22         9         0.2           (1,366)         1:A:13:ARG:HB2         1:A:16:ILE:HG22         10         0.2           (1,366)         1:A:13:ARG:HB2         1:A:13:IRE:HB3         16	(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG21	4	0.2
(1,520) 1:A:22:ARG:HA 1:A:22:ARG:HG2 19 0.2 (1,493) 1:A:20:GLU:H 1:A:20:GLU:HB2 9 0.2 (1,461) 1:A:16:ILE:HG12 1:A:21:ALA:H 2 0.2 (1,459) 1:A:16:ILE:HG12 1:A:19:GIV:H 11 0.2 (1,408) 1:A:14:ARG:HD2 1:A:16:ILE:HG21 9 0.2 (1,408) 1:A:14:ARG:HD2 1:A:16:ILE:HG21 9 0.2 (1,408) 1:A:14:ARG:HD2 1:A:16:ILE:HG22 9 0.2 (1,408) 1:A:14:ARG:HD2 1:A:16:ILE:HG23 9 0.2 (1,381) 1:A:13:ARG:HB2 1:A:13:ARG:HD2 10 0.2 (1,386) 1:A:13:ARG:H 1:A:13:ARG:HB2 17 0.2 (1,366) 1:A:13:ARG:H 1:A:13:ARG:HB2 17 0.2 (1,366) 1:A:13:ARG:H 1:A:13:ARG:HB2 17 0.2 (1,2712) 1:A:181:GIY:H 1:A:181:GIY:HA2 3 0.2 (1,259) 1:A:176:ALA:HA 1:A:179:HIS:HB3 16 0.2 (1,2531) 1:A:165:ARG:HE 1:A:130:GLU:HG2 16 0.2 (1,2531) 1:A:165:ARG:HG2 1:A:166:ILE:H 2 0.2 (1,2531) 1:A:165:ARG:HG2 1:A:166:ILE:H 4 0.2 (1,2531) 1:A:165:ARG:HG2 1:A:166:ILE:H 4 0.2 (1,2529) 1:A:165:ARG:HB2 1:A:166:ILE:H 4 0.2 (1,2528) 1:A:165:ARG:HB2 1:A:166:ILE:H 4 0.2 (1,2432) 1:A:153:ALA:HB1 1:A:154:ALA:H 2 0.2 (1,2432) 1:A:153:ALA:HB1 1:A:154:ALA:H 2 0.2 (1,2432) 1:A:153:ALA:HB3 1:A:154:ALA:H 2 0.2 (1,2432) 1:A:153:ALA:HB3 1:A:154:ALA:H 2 0.2 (1,2403) 1:A:149:VAL:HG11 1:A:150:PRO:HD2 1 0.2 (1,2403) 1:A:131:MET:HG2 1:A:132:ALA:HB3 14 (1,2433) 1:A:131:MET:HG2 1:A:132:ALA:HB3 14 (1,2433) 1:A:131:MET:HG2 1:A:132:ALA:HB3 14 (1,2233) 1:A:131:MET:HG2 1:A:132:ALA:HB3 14 (1,2233) 1:A:131:MET:HG2 1:A:132:ALA:HB3 14 (1,2233) 1:A:131:MET:HG2 1:A:132:ALA:HB3 14 (1,2230) 1:A:131:MET:HG2 1:A:167:SER:HB2 6 0.2 (1,2230) 1:A:131:MET:HE2 1:A:167:SER:HB2 6 0.2 (1,2230) 1:A:131:MET:HE3 1:A:167:SER:HB2 6 0.2 (1,2230) 1:A:131	(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG22	4	0.2
(1,493)         1:A:20:GLU:H         1:A:20:GLU:HB2         9         0.2           (1,461)         1:A:16:ILE:HG12         1:A:21:ALA:H         2         0.2           (1,459)         1:A:16:ILE:HG12         1:A:19:GLY:H         11         0.2           (1,408)         1:A:14:ARG:HD2         1:A:16:ILE:HG21         9         0.2           (1,408)         1:A:14:ARG:HD2         1:A:16:ILE:HG23         9         0.2           (1,381)         1:A:13:ARG:HB2         1:A:13:ARG:HB2         10         0.2           (1,386)         1:A:13:ARG:HB2         1:A:13:ARG:HB2         10         0.2           (1,366)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB2         17         0.2           (1,366)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB2         17         0.2           (1,366)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB2         17         0.2           (1,2712)         1:A:181:GLY:H         1:A:181:GLY:HA2         3         0.2           (1,255)         1:A:19:ARG:HB         1:A:179:HIS:HB3         16         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         2         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         9	(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG23	4	0.2
(1,461)         1:A:16:ILE:HG12         1:A:21:ALA:H         2         0.2           (1,459)         1:A:16:ILE:HG12         1:A:19:GLY:H         11         0.2           (1,408)         1:A:14:ARG:HD2         1:A:16:ILE:HG21         9         0.2           (1,408)         1:A:14:ARG:HD2         1:A:16:ILE:HG22         9         0.2           (1,408)         1:A:14:ARG:HD2         1:A:16:ILE:HG23         9         0.2           (1,408)         1:A:13:ARG:HD2         1:A:13:ARG:HD2         10         0.2           (1,366)         1:A:13:ARG:HB2         1:A:13:ARG:HD2         10         0.2           (1,366)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB2         17         0.2           (1,366)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB2         17         0.2           (1,366)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB2         17         0.2           (1,366)         1:A:18:GIY:H         1:A:18:GIY:HA2:A         3         0.2           (1,2712)         1:A:18:GIY:H         1:A:18:GIY:HA2:A         3         0.2           (1,253)         1:A:16:ALA:HA         1:A:17:9:HIS:HB3         16         0.2           (1,2531)         1:A:16:ALA:HG2:ALA:HB2         1:A:16:IB:HB2 <t< td=""><td>(1,520)</td><td>1:A:22:ARG:HA</td><td>1:A:22:ARG:HG2</td><td>19</td><td>0.2</td></t<>	(1,520)	1:A:22:ARG:HA	1:A:22:ARG:HG2	19	0.2
(1,459)         1:A:16:ILE:HG12         1:A:19:GLY:H         11         0.2           (1,408)         1:A:14:ARG:HD2         1:A:16:ILE:HG21         9         0.2           (1,408)         1:A:14:ARG:HD2         1:A:16:ILE:HG22         9         0.2           (1,408)         1:A:13:ARG:HD2         1:A:16:ILE:HG23         9         0.2           (1,381)         1:A:13:ARG:HB2         1:A:13:ARG:HD2         10         0.2           (1,366)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB2         6         0.2           (1,366)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB2         17         0.2           (1,2712)         1:A:181:GLY:H         1:A:181:GLY:HA2         3         0.2           (1,2712)         1:A:181:GCY:H         1:A:181:GLY:HA2         3         0.2           (1,2712)         1:A:181:GCY:H         1:A:181:GLY:HA2         3         0.2           (1,2712)         1:A:181:GCY:H         1:A:181:GLY:HA2         3         0.2           (1,2712)         1:A:161:GC:HB2:H         16         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:H         2         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         2         0.2	(1,493)	1:A:20:GLU:H	1:A:20:GLU:HB2	9	0.2
(1,408)         1:A:14:ARG:HD2         1:A:16:ILE:HG21         9         0.2           (1,408)         1:A:14:ARG:HD2         1:A:16:ILE:HG22         9         0.2           (1,408)         1:A:14:ARG:HD2         1:A:16:ILE:HG23         9         0.2           (1,381)         1:A:13:ARG:HB2         1:A:13:ARG:HD2         10         0.2           (1,366)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB2         6         0.2           (1,366)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB2         17         0.2           (1,2712)         1:A:181:GLY:H         1:A:181:GLY:HA2         3         0.2           (1,2659)         1:A:176:ALA:HA         1:A:181:GLY:HB3         16         0.2           (1,255)         1:A:9:ARG:HE         1:A:130:GLU:HG2         16         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         2         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         6         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         19         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:H         4         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:H <td< td=""><td>(1,461)</td><td>1:A:16:ILE:HG12</td><td>1:A:21:ALA:H</td><td>2</td><td>0.2</td></td<>	(1,461)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:21:ALA:H	2	0.2
(1,408)         1:A:14:ARG:HD2         1:A:16:ILE:HG22         9         0.2           (1,408)         1:A:14:ARG:HD2         1:A:16:ILE:HG23         9         0.2           (1,381)         1:A:13:ARG:HB2         1:A:13:ARG:HD2         10         0.2           (1,366)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB2         6         0.2           (1,366)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB2         17         0.2           (1,2712)         1:A:181:GLY:H         1:A:181:GLY:HA2         3         0.2           (1,2659)         1:A:176:ALA:HA         1:A:179:HIS:HB3         16         0.2           (1,255)         1:A:9:ARG:HE         1:A:130:GLU:HG2         16         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         2         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         6         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:H         19         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:H         4         0.2           (1,2529)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:H         4         0.2           (1,2432)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:H <td< td=""><td>(1,459)</td><td>1:A:16:ILE:HG12</td><td>1:A:19:GLY:H</td><td>11</td><td>0.2</td></td<>	(1,459)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:19:GLY:H	11	0.2
(1,408)         1:A:14:ARG:HD2         1:A:16:ILE:HG23         9         0.2           (1,381)         1:A:13:ARG:HB2         1:A:13:ARG:HD2         10         0.2           (1,366)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB2         6         0.2           (1,366)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB2         17         0.2           (1,2712)         1:A:181:GLY:H         1:A:181:GLY:HA2         3         0.2           (1,2659)         1:A:176:ALA:HA         1:A:179:HIS:HB3         16         0.2           (1,255)         1:A:9:ARG:HE         1:A:130:GLU:HG2         16         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         2         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         6         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         19         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:H         4         0.2           (1,2529)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:H         4         0.2           (1,2528)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:H         4         0.2           (1,2432)         1:A:153:ALA:HB1         1:A:154:ALA:H <td< td=""><td>(1,408)</td><td>1:A:14:ARG:HD2</td><td>1:A:16:ILE:HG21</td><td>9</td><td>0.2</td></td<>	(1,408)	1:A:14:ARG:HD2	1:A:16:ILE:HG21	9	0.2
(1,381)         1:A:13:ARG:HB2         1:A:13:ARG:HB2         10         0.2           (1,366)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB2         6         0.2           (1,366)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB2         17         0.2           (1,2712)         1:A:181:GLY:H         1:A:181:GLY:HA2         3         0.2           (1,2659)         1:A:176:ALA:HA         1:A:179:HIS:HB3         16         0.2           (1,255)         1:A:9:ARG:HE         1:A:130:GLU:HG2         16         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         2         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         6         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         19         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         19         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:H         4         0.2           (1,2529)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:H         4         0.2           (1,2528)         1:A:164:MET:H         1:A:165:ARG:HD2         2         0.2           (1,2432)         1:A:164:MET:H         1:A:165:ARG:HD2 <t< td=""><td>(1,408)</td><td>1:A:14:ARG:HD2</td><td>1:A:16:ILE:HG22</td><td>9</td><td>0.2</td></t<>	(1,408)	1:A:14:ARG:HD2	1:A:16:ILE:HG22	9	0.2
(1,366)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB2         6         0.2           (1,366)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB2         17         0.2           (1,2712)         1:A:181:GLY:H         1:A:181:GLY:HA2         3         0.2           (1,2659)         1:A:176:ALA:HA         1:A:179:HIS:HB3         16         0.2           (1,255)         1:A:9:ARG:HE         1:A:130:GLU:HG2         16         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         2         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         6         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         19         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         4         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:H         19         0.2           (1,2529)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:H         4         0.2           (1,2528)         1:A:164:MET:H         1:A:165:ARG:HD2         2         0.2           (1,2432)         1:A:164:MET:H         1:A:164:MET:HG2         14         0.2           (1,2432)         1:A:153:ALA:HB3         1:A:154:ALA:H         <	(1,408)	1:A:14:ARG:HD2	1:A:16:ILE:HG23	9	0.2
(1,366)         1:A:13:ARG:H         1:A:13:ARG:HB2         17         0.2           (1,2712)         1:A:181:GLY:H         1:A:181:GLY:HA2         3         0.2           (1,2659)         1:A:176:ALA:HA         1:A:179:HIS:HB3         16         0.2           (1,255)         1:A:9:ARG:HE         1:A:130:GLU:HG2         16         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         2         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         6         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         19         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:H         19         0.2           (1,2529)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:H         4         0.2           (1,2529)         1:A:164:MET:H         19         0.2         0.2           (1,2507)         1:A:164:MET:H         1:A:165:ARG:HD2         1 </td <td>(1,381)</td> <td>1:A:13:ARG:HB2</td> <td>1:A:13:ARG:HD2</td> <td>10</td> <td>0.2</td>	(1,381)	1:A:13:ARG:HB2	1:A:13:ARG:HD2	10	0.2
(1,2712)         1:A:181:GLY:H         1:A:181:GLY:HA2         3         0.2           (1,2659)         1:A:176:ALA:HA         1:A:179:HIS:HB3         16         0.2           (1,255)         1:A:9:ARG:HE         1:A:130:GLU:HG2         16         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         2         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         6         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         19         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:H         19         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:H         19         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:H         19         0.2           (1,2529)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:H         4         0.2           (1,2529)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:H         4         0.2           (1,2528)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:H         4         0.2           (1,2528)         1:A:164:MET:H         1         0.2           (1,2432)         1:A:164:MET:H         1:A:165:ARG:HB2         14         0.2<	(1,366)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HB2	6	0.2
(1,2659)         1:A:176:ALA:HA         1:A:179:HIS:HB3         16         0.2           (1,255)         1:A:9:ARG:HE         1:A:130:GLU:HG2         16         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         2         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         6         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         19         0.2           (1,2529)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:H         4         0.2           (1,2528)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:165:ARG:HD2         2         0.2           (1,2507)         1:A:164:MET:H         1:A:164:MET:HG2         14         0.2           (1,2432)         1:A:153:ALA:HB1         1:A:154:ALA:H         2         0.2           (1,2432)         1:A:153:ALA:HB2         1:A:154:ALA:H         2         0.2           (1,2432)         1:A:153:ALA:HB3         1:A:154:ALA:H         2         0.2           (1,2432)         1:A:159:PRO:HB2         1:A:151:GLU:H         17         0.2           (1,2400)         1:A:149:VAL:HG11         1:A:150:PRO:HD2         1         0.2           (1,2403)         1:A:131:MET:HG2         1:A:132:ALA:HB3 <td>(1,366)</td> <td>1:A:13:ARG:H</td> <td>1:A:13:ARG:HB2</td> <td>17</td> <td>0.2</td>	(1,366)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HB2	17	0.2
(1,255)         1:A:9:ARG:HE         1:A:130:GLU:HG2         16         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         2         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         6         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         19         0.2           (1,2529)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:H         4         0.2           (1,2528)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:165:ARG:HD2         2         0.2           (1,2507)         1:A:164:MET:H         1:A:164:MET:HG2         14         0.2           (1,2432)         1:A:153:ALA:HB1         1:A:154:ALA:H         2         0.2           (1,2432)         1:A:153:ALA:HB2         1:A:154:ALA:H         2         0.2           (1,2432)         1:A:153:ALA:HB3         1:A:154:ALA:H         2         0.2           (1,2432)         1:A:150:PRO:HB2         1:A:151:GLU:H         17         0.2           (1,2432)         1:A:149:VAL:HG11         1:A:150:PRO:HD2         1         0.2           (1,2403)         1:A:149:VAL:HG13         1:A:150:PRO:HD2         1         0.2           (1,2403)         1:A:131:MET:HG2         1:A:132:ALA:HB1 </td <td>(1,2712)</td> <td>1:A:181:GLY:H</td> <td>1:A:181:GLY:HA2</td> <td>3</td> <td>0.2</td>	(1,2712)	1:A:181:GLY:H	1:A:181:GLY:HA2	3	0.2
(1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         2         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         6         0.2           (1,2531)         1:A:165:ARG:HG2         1:A:166:ILE:H         19         0.2           (1,2529)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:166:ILE:H         4         0.2           (1,2528)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:165:ARG:HD2         2         0.2           (1,2507)         1:A:164:MET:H         1:A:164:MET:HG2         14         0.2           (1,2432)         1:A:153:ALA:HB1         1:A:154:ALA:H         2         0.2           (1,2432)         1:A:153:ALA:HB2         1:A:154:ALA:H         2         0.2           (1,2432)         1:A:153:ALA:HB3         1:A:154:ALA:H         2         0.2           (1,2432)         1:A:150:PRO:HB2         1:A:151:GLU:H         17         0.2           (1,2430)         1:A:149:VAL:HG11         1:A:150:PRO:HD2         1         0.2           (1,2403)         1:A:149:VAL:HG12         1:A:150:PRO:HD2         1         0.2           (1,2233)         1:A:131:MET:HG2         1:A:132:ALA:HB1         14         0.2           (1,2233)         1:A:131:MET:HG2         1:A:132:ALA:H	(1,2659)	1:A:176:ALA:HA	1:A:179:HIS:HB3	16	0.2
(1,2531)       1:A:165:ARG:HG2       1:A:166:ILE:H       6       0.2         (1,2531)       1:A:165:ARG:HG2       1:A:166:ILE:H       19       0.2         (1,2529)       1:A:165:ARG:HB2       1:A:166:ILE:H       4       0.2         (1,2528)       1:A:165:ARG:HB2       1:A:165:ARG:HD2       2       0.2         (1,2507)       1:A:164:MET:H       1:A:164:MET:HG2       14       0.2         (1,2432)       1:A:153:ALA:HB1       1:A:154:ALA:H       2       0.2         (1,2432)       1:A:153:ALA:HB2       1:A:154:ALA:H       2       0.2         (1,2432)       1:A:153:ALA:HB3       1:A:154:ALA:H       2       0.2         (1,2432)       1:A:153:ALA:HB3       1:A:151:GLU:H       17       0.2         (1,2430)       1:A:149:VAL:HG11       1:A:150:PRO:HD2       1       0.2         (1,2403)       1:A:149:VAL:HG12       1:A:150:PRO:HD2       1       0.2         (1,2403)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB1       14       0.2         (1,2233)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB2       14       0.2         (1,2233)       1:A:131:MET:HG2       1:A:167:SER:HB2       6       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE2	(1,255)	1:A:9:ARG:HE	1:A:130:GLU:HG2	16	0.2
(1,2531)       1:A:165:ARG:HG2       1:A:166:ILE:H       19       0.2         (1,2529)       1:A:165:ARG:HB2       1:A:166:ILE:H       4       0.2         (1,2528)       1:A:165:ARG:HB2       1:A:165:ARG:HD2       2       0.2         (1,2507)       1:A:164:MET:H       1:A:164:MET:HG2       14       0.2         (1,2432)       1:A:153:ALA:HB1       1:A:154:ALA:H       2       0.2         (1,2432)       1:A:153:ALA:HB2       1:A:154:ALA:H       2       0.2         (1,2432)       1:A:153:ALA:HB3       1:A:154:ALA:H       2       0.2         (1,2432)       1:A:153:ALA:HB3       1:A:154:ALA:H       2       0.2         (1,2432)       1:A:150:PRO:HB2       1:A:151:GLU:H       17       0.2         (1,2403)       1:A:149:VAL:HG11       1:A:150:PRO:HD2       1       0.2         (1,2403)       1:A:149:VAL:HG12       1:A:150:PRO:HD2       1       0.2         (1,2403)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB1       14       0.2         (1,2233)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB2       14       0.2         (1,2233)       1:A:131:MET:HG2       1:A:167:SER:HB2       6       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE3	(1,2531)	1:A:165:ARG:HG2	1:A:166:ILE:H	2	0.2
(1,2529)       1:A:165:ARG:HB2       1:A:166:ILE:H       4       0.2         (1,2528)       1:A:165:ARG:HB2       1:A:165:ARG:HD2       2       0.2         (1,2507)       1:A:164:MET:H       1:A:164:MET:HG2       14       0.2         (1,2432)       1:A:153:ALA:HB1       1:A:154:ALA:H       2       0.2         (1,2432)       1:A:153:ALA:HB2       1:A:154:ALA:H       2       0.2         (1,2432)       1:A:153:ALA:HB3       1:A:154:ALA:H       2       0.2         (1,2432)       1:A:153:ALA:HB3       1:A:154:ALA:H       2       0.2         (1,2432)       1:A:150:PRO:HB2       1:A:151:GLU:H       17       0.2         (1,2410)       1:A:149:VAL:HG11       1:A:150:PRO:HD2       1       0.2         (1,2403)       1:A:149:VAL:HG12       1:A:150:PRO:HD2       1       0.2         (1,2403)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB1       14       0.2         (1,2233)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB2       14       0.2         (1,2233)       1:A:131:MET:HG2       1:A:167:SER:HB2       6       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE2       1:A:167:SER:HB2       6       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE3	(1,2531)	1:A:165:ARG:HG2	1:A:166:ILE:H	6	0.2
(1,2528)         1:A:165:ARG:HB2         1:A:165:ARG:HD2         2         0.2           (1,2507)         1:A:164:MET:H         1:A:164:MET:HG2         14         0.2           (1,2432)         1:A:153:ALA:HB1         1:A:154:ALA:H         2         0.2           (1,2432)         1:A:153:ALA:HB2         1:A:154:ALA:H         2         0.2           (1,2432)         1:A:153:ALA:HB3         1:A:154:ALA:H         2         0.2           (1,2432)         1:A:150:PRO:HB2         1:A:151:GLU:H         17         0.2           (1,2403)         1:A:150:PRO:HB2         1:A:150:PRO:HD2         1         0.2           (1,2403)         1:A:149:VAL:HG11         1:A:150:PRO:HD2         1         0.2           (1,2403)         1:A:149:VAL:HG13         1:A:150:PRO:HD2         1         0.2           (1,2403)         1:A:131:MET:HG2         1:A:132:ALA:HB1         14         0.2           (1,2233)         1:A:131:MET:HG2         1:A:132:ALA:HB2         14         0.2           (1,2233)         1:A:131:MET:HG2         1:A:132:ALA:HB3         14         0.2           (1,2230)         1:A:131:MET:HE1         1:A:167:SER:HB2         6         0.2           (1,2230)         1:A:131:MET:HE3         1:A:	(1,2531)	1:A:165:ARG:HG2	1:A:166:ILE:H	19	0.2
(1,2507)         1:A:164:MET:H         1:A:164:MET:HG2         14         0.2           (1,2432)         1:A:153:ALA:HB1         1:A:154:ALA:H         2         0.2           (1,2432)         1:A:153:ALA:HB2         1:A:154:ALA:H         2         0.2           (1,2432)         1:A:153:ALA:HB3         1:A:154:ALA:H         2         0.2           (1,2432)         1:A:150:PRO:HB2         1:A:151:GLU:H         17         0.2           (1,2410)         1:A:150:PRO:HB2         1         0.2           (1,2403)         1:A:149:VAL:HG11         1:A:150:PRO:HD2         1         0.2           (1,2403)         1:A:149:VAL:HG12         1:A:150:PRO:HD2         1         0.2           (1,2403)         1:A:131:MET:HG2         1:A:132:ALA:HB1         14         0.2           (1,2233)         1:A:131:MET:HG2         1:A:132:ALA:HB2         14         0.2           (1,2233)         1:A:131:MET:HG2         1:A:132:ALA:HB3         14         0.2           (1,2230)         1:A:131:MET:HE1         1:A:167:SER:HB2         6         0.2           (1,2230)         1:A:131:MET:HE3         1:A:167:SER:HB2         6         0.2	(1,2529)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:166:ILE:H	4	0.2
(1,2432)       1:A:153:ALA:HB1       1:A:154:ALA:H       2       0.2         (1,2432)       1:A:153:ALA:HB2       1:A:154:ALA:H       2       0.2         (1,2432)       1:A:153:ALA:HB3       1:A:154:ALA:H       2       0.2         (1,2432)       1:A:150:PRO:HB2       1:A:151:GLU:H       17       0.2         (1,2410)       1:A:150:PRO:HB2       1:A:150:PRO:HD2       1       0.2         (1,2403)       1:A:149:VAL:HG11       1:A:150:PRO:HD2       1       0.2         (1,2403)       1:A:149:VAL:HG12       1:A:150:PRO:HD2       1       0.2         (1,2403)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB1       14       0.2         (1,2233)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB2       14       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB3       14       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE1       1:A:167:SER:HB2       6       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE3       1:A:167:SER:HB2       6       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE3       1:A:167:SER:HB2       6       0.2	(1,2528)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:165:ARG:HD2	2	0.2
(1,2432)       1:A:153:ALA:HB2       1:A:154:ALA:H       2       0.2         (1,2432)       1:A:153:ALA:HB3       1:A:154:ALA:H       2       0.2         (1,2410)       1:A:150:PRO:HB2       1:A:151:GLU:H       17       0.2         (1,2403)       1:A:149:VAL:HG11       1:A:150:PRO:HD2       1       0.2         (1,2403)       1:A:149:VAL:HG12       1:A:150:PRO:HD2       1       0.2         (1,2403)       1:A:149:VAL:HG13       1:A:150:PRO:HD2       1       0.2         (1,2403)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB1       14       0.2         (1,2233)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB2       14       0.2         (1,2233)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB3       14       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE1       1:A:167:SER:HB2       6       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE2       1:A:167:SER:HB2       6       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE3       1:A:167:SER:HB2       6       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE3       1:A:167:SER:HB2       6       0.2	(1,2507)	1:A:164:MET:H	1:A:164:MET:HG2	14	0.2
(1,2432)       1:A:153:ALA:HB2       1:A:154:ALA:H       2       0.2         (1,2432)       1:A:153:ALA:HB3       1:A:154:ALA:H       2       0.2         (1,2410)       1:A:150:PRO:HB2       1:A:151:GLU:H       17       0.2         (1,2403)       1:A:149:VAL:HG11       1:A:150:PRO:HD2       1       0.2         (1,2403)       1:A:149:VAL:HG12       1:A:150:PRO:HD2       1       0.2         (1,2403)       1:A:149:VAL:HG13       1:A:150:PRO:HD2       1       0.2         (1,2403)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB1       14       0.2         (1,2233)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB2       14       0.2         (1,2233)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB3       14       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE1       1:A:167:SER:HB2       6       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE2       1:A:167:SER:HB2       6       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE3       1:A:167:SER:HB2       6       0.2	(1,2432)	1:A:153:ALA:HB1	1:A:154:ALA:H	2	0.2
(1,2410)       1:A:150:PRO:HB2       1:A:151:GLU:H       17       0.2         (1,2403)       1:A:149:VAL:HG11       1:A:150:PRO:HD2       1       0.2         (1,2403)       1:A:149:VAL:HG12       1:A:150:PRO:HD2       1       0.2         (1,2403)       1:A:149:VAL:HG13       1:A:150:PRO:HD2       1       0.2         (1,2233)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB1       14       0.2         (1,2233)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB2       14       0.2         (1,2233)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB3       14       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE1       1:A:167:SER:HB2       6       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE2       1:A:167:SER:HB2       6       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE3       1:A:167:SER:HB2       6       0.2		1:A:153:ALA:HB2	1:A:154:ALA:H	2	0.2
(1,2403)       1:A:149:VAL:HG11       1:A:150:PRO:HD2       1       0.2         (1,2403)       1:A:149:VAL:HG12       1:A:150:PRO:HD2       1       0.2         (1,2403)       1:A:149:VAL:HG13       1:A:150:PRO:HD2       1       0.2         (1,2233)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB1       14       0.2         (1,2233)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB2       14       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB3       14       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE1       1:A:167:SER:HB2       6       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE2       1:A:167:SER:HB2       6       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE3       1:A:167:SER:HB2       6       0.2	(1,2432)	1:A:153:ALA:HB3	1:A:154:ALA:H	2	0.2
(1,2403)       1:A:149:VAL:HG12       1:A:150:PRO:HD2       1       0.2         (1,2403)       1:A:149:VAL:HG13       1:A:150:PRO:HD2       1       0.2         (1,2233)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB1       14       0.2         (1,2233)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB2       14       0.2         (1,2233)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB3       14       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE1       1:A:167:SER:HB2       6       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE2       1:A:167:SER:HB2       6       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE3       1:A:167:SER:HB2       6       0.2	(1,2410)	1:A:150:PRO:HB2	1:A:151:GLU:H	17	0.2
(1,2403)       1:A:149:VAL:HG13       1:A:150:PRO:HD2       1       0.2         (1,2233)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB1       14       0.2         (1,2233)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB2       14       0.2         (1,2233)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB3       14       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE1       1:A:167:SER:HB2       6       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE2       1:A:167:SER:HB2       6       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE3       1:A:167:SER:HB2       6       0.2	(1,2403)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:150:PRO:HD2	1	0.2
(1,2233)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB1       14       0.2         (1,2233)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB2       14       0.2         (1,2233)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB3       14       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE1       1:A:167:SER:HB2       6       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE2       1:A:167:SER:HB2       6       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE3       1:A:167:SER:HB2       6       0.2	(1,2403)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:150:PRO:HD2	1	0.2
(1,2233)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB2       14       0.2         (1,2233)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB3       14       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE1       1:A:167:SER:HB2       6       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE2       1:A:167:SER:HB2       6       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE3       1:A:167:SER:HB2       6       0.2	(1,2403)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:150:PRO:HD2	1	0.2
(1,2233)       1:A:131:MET:HG2       1:A:132:ALA:HB3       14       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE1       1:A:167:SER:HB2       6       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE2       1:A:167:SER:HB2       6       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE3       1:A:167:SER:HB2       6       0.2	(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB1	14	0.2
(1,2230)       1:A:131:MET:HE1       1:A:167:SER:HB2       6       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE2       1:A:167:SER:HB2       6       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE3       1:A:167:SER:HB2       6       0.2	(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB2	14	0.2
(1,2230)       1:A:131:MET:HE2       1:A:167:SER:HB2       6       0.2         (1,2230)       1:A:131:MET:HE3       1:A:167:SER:HB2       6       0.2	(1,2233)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:HB3	14	0.2
(1,2230) 1:A:131:MET:HE3 1:A:167:SER:HB2 6 0.2	(1,2230)	1:A:131:MET:HE1	1:A:167:SER:HB2	6	0.2
	(1,2230)	1:A:131:MET:HE2	1:A:167:SER:HB2	6	0.2
(1,2161) 1:A:126:GLY:HA2 1:A:174:TRP:HZ3 4 0.2	(1,2230)	1:A:131:MET:HE3	1:A:167:SER:HB2	6	0.2
	(1,2161)	1:A:126:GLY:HA2	1:A:174:TRP:HZ3	4	0.2



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2102)	1:A:123:VAL:HA	1:A:178:VAL:H	8	0.2
(1,2042)	1:A:119:GLU:HG2	1:A:178:VAL:HG11	15	0.2
(1,2042)	1:A:119:GLU:HG2	1:A:178:VAL:HG12	15	0.2
(1,2042)	1:A:119:GLU:HG2	1:A:178:VAL:HG13	15	0.2
(1,1798)	1:A:100:ARG:HG2	1:A:101:LEU:H	15	0.2
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HD21	20	0.2
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HD22	20	0.2
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HD23	20	0.2
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HD21	20	0.2
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HD22	20	0.2
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HD23	20	0.2
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HD21	20	0.2
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HD22	20	0.2
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HD23	20	0.2
(1,1716)	1:A:92:LYS:HG2	1:A:121:MET:HE1	7	0.2
(1,1716)	1:A:92:LYS:HG2	1:A:121:MET:HE2	7	0.2
(1,1716)	1:A:92:LYS:HG2	1:A:121:MET:HE3	7	0.2
(1,1707)	1:A:92:LYS:H	1:A:92:LYS:HG2	9	0.2
(1,1696)	1:A:90:GLU:HA	1:A:90:GLU:HG2	5	0.2
(1,1575)	1:A:83:LEU:H	1:A:99:LEU:HB2	1	0.2
(1,1575)	1:A:83:LEU:H	1:A:99:LEU:HB2	20	0.2
(1,1563)	1:A:82:ARG:HA	1:A:82:ARG:HD2	13	0.2
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	20	0.2
(1,1420)	1:A:69:ASN:HA	1:A:89:TYR:HE1	16	0.2
(1,1336)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HD11	6	0.2
(1,1336)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HD12	6	0.2
(1,1336)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HD13	6	0.2
(1,1243)	1:A:53:GLU:H	1:A:54:PRO:HD2	8	0.2
(1,1122)	1:A:46:ARG:HG2	1:A:47:ILE:H	12	0.2
(1,1110)	1:A:46:ARG:HA	1:A:49:ARG:HG2	2	0.2
(1,1109)	1:A:46:ARG:HA	1:A:49:ARG:HD2	5	0.2
(1,940)	1:A:36:GLU:HG2	1:A:37:VAL:H	4	0.19
(1,919)	1:A:35:ASP:H	1:A:35:ASP:HB2	8	0.19
(1,899)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:38:TRP:HD1	15	0.19
(1,899)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:38:TRP:HD1	15	0.19
(1,899)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:38:TRP:HD1	15	0.19
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG21	6	0.19
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG22	6	0.19
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG23	6	0.19
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	20	0.19
(1,781)	1:A:30:TYR:HA	1:A:30:TYR:HD1	12	0.19
(1,750)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HE1	18	0.19



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,746)	1:A:28:GLN:HG3	1:A:29:ARG:H	13	0.19
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD21	11	0.19
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD22	11	0.19
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD23	11	0.19
(1,63)	1:A:65:ALA:H	1:A:55:LYS:O	18	0.19
(1,551)	1:A:23:SER:HB3	1:A:113:GLU:HG2	8	0.19
(1,51)	1:A:51:PHE:H	1:A:47:ILE:O	11	0.19
(1,408)	1:A:14:ARG:HD2	1:A:16:ILE:HG21	1	0.19
(1,408)	1:A:14:ARG:HD2	1:A:16:ILE:HG22	1	0.19
(1,408)	1:A:14:ARG:HD2	1:A:16:ILE:HG23	1	0.19
(1,404)	1:A:14:ARG:HB2	1:A:14:ARG:HD2	3	0.19
(1,399)	1:A:14:ARG:HE	1:A:15:THR:H	3	0.19
(1,399)	1:A:14:ARG:HE	1:A:15:THR:H	17	0.19
(1,381)	1:A:13:ARG:HB2	1:A:13:ARG:HD2	4	0.19
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD11	20	0.19
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD12	20	0.19
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD13	20	0.19
(1,332)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:181:GLY:H	9	0.19
(1,332)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:181:GLY:H	9	0.19
(1,332)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:181:GLY:H	9	0.19
(1,2706)	1:A:179:HIS:H	1:A:180:SER:HB2	14	0.19
(1,2654)	1:A:176:ALA:H	1:A:177:LEU:HB2	2	0.19
(1,2654)	1:A:176:ALA:H	1:A:177:LEU:HB2	4	0.19
(1,2519)	1:A:165:ARG:H	1:A:165:ARG:HB2	1	0.19
(1,2518)	1:A:164:MET:HG2	1:A:165:ARG:H	10	0.19
(1,2506)	1:A:164:MET:H	1:A:164:MET:HB2	15	0.19
(1,2456)	1:A:158:GLU:H	1:A:159:PRO:HD2	12	0.19
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB1	1:A:154:ALA:H	9	0.19
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB2	1:A:154:ALA:H	9	0.19
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB3	1:A:154:ALA:H	9	0.19
(1,2392)	1:A:148:PRO:HD2	1:A:149:VAL:H	8	0.19
(1,2360)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:143:ASP:H	18	0.19
(1,2353)	1:A:141:ARG:H	1:A:141:ARG:HG2	5	0.19
(1,2352)	1:A:141:ARG:H	1:A:141:ARG:HD2	5	0.19
(1,229)	1:A:8:GLU:HA	1:A:8:GLU:HG2	10	0.19
(1,2232)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:H	13	0.19
(1,2230)	1:A:131:MET:HE1	1:A:167:SER:HB2	3	0.19
(1,2230)	1:A:131:MET:HE2	1:A:167:SER:HB2	3	0.19
(1,2230)	1:A:131:MET:HE3	1:A:167:SER:HB2	3	0.19
(1,2050)	1:A:120:GLN:HB2	1:A:121:MET:H	13	0.19
(1,2016)	1:A:118:SER:H	1:A:121:MET:HB2	3	0.19
(1,200)	1:A:5:GLN:HG2	1:A:6:ALA:H	4	0.19



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,196)	1:A:5:GLN:HA	1:A:6:ALA:H	7	0.19
(1,193)	1:A:5:GLN:H	1:A:5:GLN:HB2	7	0.19
(1,193)	1:A:5:GLN:H	1:A:5:GLN:HB2	9	0.19
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HB2	10	0.19
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HB2	10	0.19
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HB2	10	0.19
(1,1918)	1:A:110:LEU:HG	1:A:111:GLU:H	10	0.19
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD11	4	0.19
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD12	4	0.19
(1,1775)	1:A:99:LEU:HA	1:A:99:LEU:HD13	4	0.19
(1,1597)	1:A:84:THR:HG21	1:A:96:GLU:HG3	17	0.19
(1,1597)	1:A:84:THR:HG22	1:A:96:GLU:HG3	17	0.19
(1,1597)	1:A:84:THR:HG23	1:A:96:GLU:HG3	17	0.19
(1,1451)	1:A:71:SER:HB2	1:A:72:GLY:H	14	0.19
(1,1388)	1:A:66:LEU:H	1:A:71:SER:HB2	10	0.19
(1,1275)	1:A:55:LYS:HG2	1:A:56:GLY:H	5	0.19
(1,1246)	1:A:53:GLU:HG2	1:A:54:PRO:HD2	1	0.19
(1,1243)	1:A:53:GLU:H	1:A:54:PRO:HD2	6	0.19
(1,1241)	1:A:53:GLU:H	1:A:53:GLU:HB2	2	0.19
(1,1231)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:55:LYS:H	15	0.19
(1,1231)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:55:LYS:H	15	0.19
(1,1231)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:55:LYS:H	15	0.19
(1,1222)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:69:ASN:HA	11	0.19
(1,1222)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:69:ASN:HA	11	0.19
(1,1222)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:69:ASN:HA	11	0.19
(1,1206)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:52:ILE:HD11	9	0.19
(1,1206)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:52:ILE:HD12	9	0.19
(1,1206)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:52:ILE:HD13	9	0.19
(1,1054)	1:A:41:CYS:H	1:A:99:LEU:HD11	10	0.19
(1,1054)	1:A:41:CYS:H	1:A:99:LEU:HD12	10	0.19
(1,1054)	1:A:41:CYS:H	1:A:99:LEU:HD13	10	0.19
(1,968)	1:A:37:VAL:HG21	1:A:108:THR:HA	15	0.18
(1,968)	1:A:37:VAL:HG22	1:A:108:THR:HA	15	0.18
(1,968)	1:A:37:VAL:HG23	1:A:108:THR:HA	15	0.18
(1,819)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:140:ILE:HD11	18	0.18
(1,819)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:140:ILE:HD12	18	0.18
(1,819)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:140:ILE:HD13	18	0.18
(1,773)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:30:TYR:H	8	0.18
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD21	3	0.18
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD22	3	0.18
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD23	3	0.18
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD21	8	0.18



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD22	8	0.18
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD23	8	0.18
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD21	18	0.18
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD22	18	0.18
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD23	18	0.18
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD11	19	0.18
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD12	19	0.18
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD13	19	0.18
(1,720)	1:A:27:ARG:HE	1:A:111:GLU:HG2	17	0.18
(1,635)	1:A:25:ILE:HG12	1:A:113:GLU:HA	10	0.18
(1,525)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:122:LEU:HD21	15	0.18
(1,525)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:122:LEU:HD22	15	0.18
(1,525)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:122:LEU:HD23	15	0.18
(1,458)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:18:ALA:H	15	0.18
(1,446)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HG21	15	0.18
(1,446)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HG22	15	0.18
(1,446)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HG23	15	0.18
(1,446)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HG21	15	0.18
(1,446)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HG22	15	0.18
(1,446)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HG23	15	0.18
(1,446)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HG21	15	0.18
(1,446)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HG22	15	0.18
(1,446)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HG23	15	0.18
(1,427)	1:A:16:ILE:H	1:A:17:PRO:HD2	4	0.18
(1,423)	1:A:15:THR:HG21	1:A:20:GLU:HG2	3	0.18
(1,423)	1:A:15:THR:HG22	1:A:20:GLU:HG2	3	0.18
(1,423)	1:A:15:THR:HG23	1:A:20:GLU:HG2	3	0.18
(1,408)	1:A:14:ARG:HD2	1:A:16:ILE:HG21	2	0.18
(1,408)	1:A:14:ARG:HD2	1:A:16:ILE:HG22	2	0.18
(1,408)	1:A:14:ARG:HD2	1:A:16:ILE:HG23	2	0.18
(1,399)	1:A:14:ARG:HE	1:A:15:THR:H	8	0.18
(1,372)	1:A:13:ARG:HA	1:A:13:ARG:HD3	9	0.18
(1,2712)	1:A:181:GLY:H	1:A:181:GLY:HA2	20	0.18
(1,2702)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB2	5	0.18
(1,269)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:174:TRP:HE1	18	0.18
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD21	9	0.18
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD22	9	0.18
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD23	9	0.18
(1,2593)	1:A:172:GLU:H	1:A:172:GLU:HB2	13	0.18
(1,2584)	1:A:170:ARG:HA	1:A:170:ARG:HE	13	0.18
(1,2563)	1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HE21	5	0.18
(1,2531)	1:A:165:ARG:HG2	1:A:166:ILE:H	8	0.18



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2507)	1:A:164:MET:H	1:A:164:MET:HG2	1	0.18
(1,2471)	1:A:160:SER:HB2	1:A:162:GLU:H	10	0.18
(1,2465)	1:A:159:PRO:HG2	1:A:160:SER:H	2	0.18
(1,2449)	1:A:157:PHE:H	1:A:157:PHE:HB2	4	0.18
(1,2439)	1:A:155:GLU:H	1:A:155:GLU:HB2	3	0.18
(1,2423)	1:A:152:ASP:H	1:A:152:ASP:HB2	5	0.18
(1,2410)	1:A:150:PRO:HB2	1:A:151:GLU:H	20	0.18
(1,2392)	1:A:148:PRO:HD2	1:A:149:VAL:H	17	0.18
(1,2381)	1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:PRO:HD2	9	0.18
(1,2381)	1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:PRO:HD2	9	0.18
(1,2381)	1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:PRO:HD2	9	0.18
(1,2354)	1:A:141:ARG:H	1:A:142:GLY:H	9	0.18
(1,2351)	1:A:141:ARG:H	1:A:141:ARG:HB2	6	0.18
(1,2302)	1:A:138:MET:HA	1:A:141:ARG:HB2	1	0.18
(1,217)	1:A:7:THR:HG21	1:A:27:ARG:HB2	14	0.18
(1,217)	1:A:7:THR:HG22	1:A:27:ARG:HB2	14	0.18
(1,217)	1:A:7:THR:HG23	1:A:27:ARG:HB2	14	0.18
(1,2041)	1:A:119:GLU:HG2	1:A:120:GLN:H	19	0.18
(1,193)	1:A:5:GLN:H	1:A:5:GLN:HB2	5	0.18
(1,1908)	1:A:109:LEU:HG	1:A:111:GLU:HG2	17	0.18
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HD21	12	0.18
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HD22	12	0.18
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HD23	12	0.18
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HD21	12	0.18
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HD22	12	0.18
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HD23	12	0.18
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HD21	12	0.18
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HD22	12	0.18
(1,1785)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HD23	12	0.18
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HG	20	0.18
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HG	20	0.18
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HG	20	0.18
(1,1686)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HD2	7	0.18
(1,1586)	1:A:83:LEU:HD21	1:A:99:LEU:HB2	20	0.18
(1,1586)	1:A:83:LEU:HD22	1:A:99:LEU:HB2	20	0.18
(1,1586)	1:A:83:LEU:HD23	1:A:99:LEU:HB2	20	0.18
(1,1563)	1:A:82:ARG:HA	1:A:82:ARG:HD2	15	0.18
(1,1507)	1:A:75:LEU:HD21	1:A:86:SER:HB2	12	0.18
(1,1507)	1:A:75:LEU:HD22	1:A:86:SER:HB2	12	0.18
(1,1507)	1:A:75:LEU:HD23	1:A:86:SER:HB2	12	0.18
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	1	0.18
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	3	0.18



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

(1,15) 1:A:22:ARG:H 1:A:116:THR:O 17 0.18 (1,1441) 1:A:70:ALA:HB1 1:A:89:TYR:HE1 10 0.18 (1,1441) 1:A:70:ALA:HB2 1:A:89:TYR:HE1 10 0.18 (1,1441) 1:A:70:ALA:HB3 1:A:89:TYR:HE1 10 0.18 (1,1441) 1:A:70:ALA:HB3 1:A:89:TYR:HE1 10 0.18 (1,1395) 1:A:66:LEU:HB2 1:A:70:ALA:H 10 0.18 (1,1395) 1:A:66:LEU:HB2 1:A:70:ALA:H 10 0.18 (1,131) 1:A:21:ALA:H 1:A:14:ARG:O 2 0.18 (1,1241) 1:A:53:GLU:H 1:A:53:GLU:HB2 1 0.18 (1,1216) 1:A:52:ILE:HD11 1:A:66:LEU:HA 14 0.18 (1,1216) 1:A:52:ILE:HD12 1:A:66:LEU:HA 14 0.18 (1,1216) 1:A:52:ILE:HD13 1:A:66:LEU:HA 14 0.18 (1,1216) 1:A:52:ILE:HD13 1:A:66:LEU:HA 14 0.18 (1,1071) 1:A:45:ASN:HA 1:A:48:ASN:HD22 13 0.18 (1,1097) 1:A:45:ASN:HA 1:A:48:ASN:HD22 13 0.18 (1,1097) 1:A:45:ASN:HA 1:A:48:ASN:HD22 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB2 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB3 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:30:ALA:HB3 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:35:ASP:H 1:A:35:ASP:HB2 16 0.18 (1,1018) 1:A:35:ASP:H 1:A:35:ASP:HB2 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HG13 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,881) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,881) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,772) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD11 3 0.17 (1,772) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD12 3 0.17 (1,772) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD11 3 0.17 (1,772) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD12 3 0.17 (1,772) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD12 3 0.17 (1,772) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD12 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD2 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:H	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1441)         1:A:70:ALA:HB2         1:A:89:TYR:HE1         10         0.18           (1,1441)         1:A:70:ALA:HB3         1:A:89:TYR:HE1         10         0.18           (1,1395)         1:A:66:LEU:HB2         1:A:70:ALA:H         10         0.18           (1,131)         1:A:53:GLU:H         1:A:53:GLU:HB2         1         0.18           (1,1241)         1:A:53:GLU:H         1:A:55:GLU:HB2         1         0.18           (1,1216)         1:A:52:ILE:HD11         1:A:66:LEU:HA         14         0.18           (1,1216)         1:A:52:ILE:HD13         1:A:66:LEU:HA         14         0.18           (1,1216)         1:A:52:ILE:HD13         1:A:66:LEU:HA         14         0.18           (1,1216)         1:A:52:ILE:HD13         1:A:66:LEU:HA         14         0.18           (1,1217)         1:A:45:ASN:HA         1:A:48:ASN:HD22         13         0.18           (1,1047)         1:A:40:ALA:HB1         1:A:46:ARG:HD2         13         0.18           (1,1047)         1:A:40:ALA:HB3         1:A:46:ARG:HD2         13         0.18           (1,1047)         1:A:40:ALA:HB3         1:A:46:ARG:HD2         13         0.18           (1,1047)         1:A:40:ALA:HB3         1:A:46:ARG:	(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	17	0.18
(1,1441) 1:A:70:ALA:HB3 1:A:89:TYR:HE1 10 0.18 (1,1395) 1:A:66:LEU:HB2 1:A:70:ALA:H 10 0.18 (1,1395) 1:A:66:LEU:HB2 1:A:70:ALA:H 10 0.18 (1,1395) 1:A:21:ALA:H 1:A:14:ARG:O 2 0.18 (1,1214) 1:A:53:GLU:H 1:A:53:GLU:HB2 1 0.18 (1,1216) 1:A:52:ILE:HD11 1:A:66:LEU:HA 14 0.18 (1,1216) 1:A:52:ILE:HD12 1:A:66:LEU:HA 14 0.18 (1,1216) 1:A:52:ILE:HD13 1:A:66:LEU:HA 14 0.18 (1,1216) 1:A:50:TRP:HE1 1:A:136:LEU:HG 13 0.18 (1,1097) 1:A:45:ASN:HA 1:A:48:ASN:HD22 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB1 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB1 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB3 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:35:XFP:HB2 1:A:39:SER:HB2 16 0.18 (1,1018) 1:A:38:TRP:HB2 1:A:39:SER:HB2 16 0.18 (1,1018) 1:A:34:AVAL:HG11 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HG13 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HG13 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,772) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:103:GLU:HG2 2 0.17 (1,772) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:103:GLU:HD1 3 0.17 (1,772) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:103:GLU:HD1 3 0.17 (1,772) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD11 3 0.17 (1,732) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD12 3 0.17 (1,732) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD13 3 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD12 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD12 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD12 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD21 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD22 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD21 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD23 5	(1,1441)	1:A:70:ALA:HB1	1:A:89:TYR:HE1	10	0.18
(1,1395) 1:A:66:LEU:HB2 1:A:70:ALA:H 10 0.18 (1,13) 1:A:21:ALA:H 1:A:14:ARG:O 2 0.18 (1,1241) 1:A:53:GLU:H 1:A:53:GLU:HB2 1 0.18 (1,1216) 1:A:52:ILE:HD11 1:A:66:LEU:HA 14 0.18 (1,1216) 1:A:52:ILE:HD12 1:A:66:LEU:HA 14 0.18 (1,1216) 1:A:52:ILE:HD13 1:A:66:LEU:HA 14 0.18 (1,1216) 1:A:52:ILE:HD13 1:A:66:LEU:HA 14 0.18 (1,1216) 1:A:50:TRP:HE1 1:A:136:LEU:HG 13 0.18 (1,107) 1:A:45:ASN:HA 1:A:48:ASN:HD22 13 0.18 (1,107) 1:A:45:ASN:HA 1:A:48:ASN:HD22 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB1 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB2 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB2 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB2 1:A:39:SER:HB2 16 0.18 (1,018) 1:A:38:TRP:HB2 1:A:39:SER:HB2 16 0.18 (1,018) 1:A:38:TRP:HB2 1:A:35:ASP:HB2 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HG13 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HB1 1:A:103:GLU:HG2 2 0.17 (1,801) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD1 3 0.17 (1,772) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD1 3 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD1 3 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD2 2 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD1 3 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD2 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2	(1,1441)	1:A:70:ALA:HB2	1:A:89:TYR:HE1	10	0.18
(1,13) 1:A:21:ALA:H 1:A:14:ARG:O 2 0.18 (1,1241) 1:A:53:GLU:H 1:A:53:GLU:HB2 1 0.18 (1,1216) 1:A:52:ILE:HD11 1:A:66:LEU:HA 14 0.18 (1,1216) 1:A:52:ILE:HD12 1:A:66:LEU:HA 14 0.18 (1,1216) 1:A:52:ILE:HD13 1:A:66:LEU:HA 14 0.18 (1,1171) 1:A:50:TRP:HE1 1:A:136:LEU:HG 13 0.18 (1,1097) 1:A:45:ASN:HA 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB1 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB2 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB2 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB3 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1017) 1:A:35:ASP:H 1:A:39:SER:HB2 16 0.18 (1,1018) 1:A:35:ASP:H 1:A:35:ASP:HB2 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HB 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HB 1:A:103:GLU:HB 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HB 1:A:103:GLU:HB 5 0.17 (1,772) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD11 3 0.17 (1,772) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD11 3 0.17 (1,772) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD12 3 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD13 3 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD2 2 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD2 2 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD2 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HB2 1:A:109	(1,1441)	1:A:70:ALA:HB3	1:A:89:TYR:HE1	10	0.18
(1,1241)         1:A:53:GLU:H         1:A:53:GLU:HB2         1         0.18           (1,1216)         1:A:52:ILE:HD11         1:A:66:LEU:HA         14         0.18           (1,1216)         1:A:52:ILE:HD12         1:A:66:LEU:HA         14         0.18           (1,1216)         1:A:52:ILE:HD13         1:A:66:LEU:HA         14         0.18           (1,1711)         1:A:50:TRP:HE1         1:A:46:LEU:HG         13         0.18           (1,1071)         1:A:45:ASN:HA         1:A:48:ASN:HD22         13         0.18           (1,1047)         1:A:40:ALA:HB1         1:A:46:ARG:HD2         13         0.18           (1,1047)         1:A:40:ALA:HB2         1:A:46:ARG:HD2         13         0.18           (1,1047)         1:A:40:ALA:HB3         1:A:40	(1,1395)	1:A:66:LEU:HB2	1:A:70:ALA:H	10	0.18
(1,1216) 1:A:52:ILE:HD11 1:A:66:LEU:HA 14 0.18 (1,1216) 1:A:52:ILE:HD12 1:A:66:LEU:HA 14 0.18 (1,1216) 1:A:52:ILE:HD13 1:A:66:LEU:HA 14 0.18 (1,1171) 1:A:50:TRP:HE1 1:A:136:LEU:HG 13 0.18 (1,1097) 1:A:45:ASN:HA 1:A:48:ASN:HD22 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB1 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB1 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB2 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB2 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB3 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:35:ASP:H 1:A:39:SER:HB2 16 0.18 (1,919) 1:A:35:ASP:H 1:A:39:SER:HB2 16 0.18 (1,919) 1:A:35:ASP:H 1:A:36:ASP:HB2 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,882) 1:A:34:VAL:HG13 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,801) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:103:GLU:HG 2 0.17 (1,772) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD11 3 0.17 (1,772) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD11 3 0.17 (1,772) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD12 3 0.17 (1,772) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD12 3 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD12 2 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD21 2 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD21 2 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD21 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD22 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD23 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD11 16 0.17 (1,727) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD12 16 0.17 (1,727) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD1	(1,13)	1:A:21:ALA:H	1:A:14:ARG:O	2	0.18
(1,1216) 1:A:52:ILE:HD12 1:A:66:LEU:HA 14 0.18 (1,1216) 1:A:52:ILE:HD13 1:A:66:LEU:HA 14 0.18 (1,1171) 1:A:50:TRP:HE1 1:A:136:LEU:HG 13 0.18 (1,1097) 1:A:45:ASN:HA 1:A:48:ASN:HD22 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB1 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB2 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB2 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB3 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB3 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB3 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1018) 1:A:38:TRP:HB2 1:A:39:SER:HB2 16 0.18 (1,1018) 1:A:35:ASP:H 1:A:35:ASP:HB2 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HG12 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HG13 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,882) 1:A:34:VAL:HB 1 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,801) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:10:LEU:HG 6 0.17 (1,772) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD11 3 0.17 (1,772) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD11 3 0.17 (1,772) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD12 3 0.17 (1,749) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD13 3 0.17 (1,749) 1:A:29:ARG:HB2 1:A:109:LEU:HD12 2 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD2 2 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD2 2 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD2 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD2 6 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD2 6 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD2 1 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD2 2 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD2 3 0.17 (1,732) 1:	(1,1241)	1:A:53:GLU:H	1:A:53:GLU:HB2	1	0.18
(1,1216) 1:A:52:ILE:HD13 1:A:66:LEU:HA 14 0.18 (1,1171) 1:A:50:TRP:HE1 1:A:136:LEU:HG 13 0.18 (1,1097) 1:A:45:ASN:HA 1:A:48:ASN:HD22 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB1 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB2 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB3 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB3 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1018) 1:A:38:TRP:HB2 1:A:39:SER:HB2 16 0.18 (1,1018) 1:A:38:TRP:HB2 1:A:39:SER:HB2 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HG12 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HG13 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HB 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,880) 1:A:34:VAL:HB 1:A:103:GLU:HG2 2 0.17 (1,801) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:110:LEU:HG 6 0.17 (1,772) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD11 3 0.17 (1,772) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD12 3 0.17 (1,772) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD12 3 0.17 (1,767) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD13 3 0.17 (1,749) 1:A:29:ARG:HB2 1:A:109:LEU:HD13 3 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD21 2 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD21 2 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD22 2 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD21 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD21 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD23 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD21 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD22 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD23 5 0.17 (1,727) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD23 5 0.17 (1,727) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:H	(1,1216)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:66:LEU:HA	14	0.18
(1,1171) 1:A:50:TRP:HE1 1:A:136:LEU:HG 13 0.18 (1,1097) 1:A:45:ASN:HA 1:A:48:ASN:HD22 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB1 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB2 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB3 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:40:ALA:HB3 1:A:46:ARG:HD2 13 0.18 (1,1047) 1:A:35:ASP:HB 1:A:39:SER:HB2 16 0.18 (1,919) 1:A:35:ASP:H 1:A:35:ASP:HB2 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HG12 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HG13 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,888) 1:A:34:VAL:HB 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,882) 1:A:34:VAL:HB 1:A:103:GLU:HA 5 0.17 (1,702) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD11 3 0.17 (1,772) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD11 3 0.17 (1,772) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD12 3 0.17 (1,772) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD13 3 0.17 (1,772) 1:A:29:ARG:HD2 1:A:109:LEU:HD13 3 0.17 (1,732) 1:A:29:ARG:HB2 1:A:30:TYR:HD1 13 0.17 (1,732) 1:A:29:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD13 2 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD21 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD21 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD22 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD21 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD21 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD22 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD21 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD22 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD23 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD21 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD22 5 0.17 (1,732) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD23 5 0.17 (1,727) 1:A:27:ARG:HG2 1:A:109:LEU:HD23	(1,1216)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:66:LEU:HA	14	0.18
(1,1097)         1:A:45:ASN:HA         1:A:48:ASN:HD22         13         0.18           (1,1047)         1:A:40:ALA:HB1         1:A:46:ARG:HD2         13         0.18           (1,1047)         1:A:40:ALA:HB2         1:A:46:ARG:HD2         13         0.18           (1,1047)         1:A:40:ALA:HB3         1:A:46:ARG:HD2         13         0.18           (1,1048)         1:A:33:ASP:HB2         16         0.18           (1,919)         1:A:33:ASP:HB2         16         0.18           (1,919)         1:A:33:ASP:HB2         15         0.17           (1,888)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HA         5         0.17           (1,888)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HA         5         0.17           (1,888)         1:A:34:VAL:HB1         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,882)         1:A:34:VAL:HB1         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,801) <td>(1,1216)</td> <td>1:A:52:ILE:HD13</td> <td>1:A:66:LEU:HA</td> <td>14</td> <td>0.18</td>	(1,1216)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:66:LEU:HA	14	0.18
(1,1047)         1:A:40:ALA:HB1         1:A:46:ARG:HD2         13         0.18           (1,1047)         1:A:40:ALA:HB2         1:A:46:ARG:HD2         13         0.18           (1,1047)         1:A:40:ALA:HB3         1:A:39:SER:HB2         16         0.18           (1,919)         1:A:35:ASP:HB         16         0.18           (1,919)         1:A:35:ASP:HB2         5         0.17           (1,888)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HA         5         0.17           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HA         5         0.17           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,880)         1:A:34:VAL:HB13         1:A:109:LEU:HD2         2         0.17           (1,801)         1:A:34:VAL:HB13         1:A:109:LEU:HD11         3         0.17	(1,1171)	1:A:50:TRP:HE1	1:A:136:LEU:HG	13	0.18
(1,1047)         1:A:40:ALA:HB2         1:A:46:ARG:HD2         13         0.18           (1,1047)         1:A:40:ALA:HB3         1:A:46:ARG:HD2         13         0.18           (1,1018)         1:A:38:TRP:HB2         1:A:39:SER:HB2         16         0.18           (1,919)         1:A:35:ASP:H         1:A:35:ASP:HB2         5         0.17           (1,888)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HA         5         0.17           (1,888)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HA         5         0.17           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HA         5         0.17           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,888)         1:A:34:VAL:HB13         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,889)         1:A:34:VAL:HB13         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,880)         1:A:34:VAL:HB13         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,801)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:109:LEU:HD11         3         0.17           (1,772)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:109:LE	(1,1097)	1:A:45:ASN:HA	1:A:48:ASN:HD22	13	0.18
(1,1047)         1:A:40:ALA:HB3         1:A:46:ARG:HD2         13         0.18           (1,1018)         1:A:38:TRP:HB2         1:A:39:SER:HB2         16         0.18           (1,919)         1:A:35:ASP:H         1:A:35:ASP:HB2         5         0.17           (1,888)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HA         5         0.17           (1,888)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HA         5         0.17           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HA         5         0.17           (1,882)         1:A:34:VAL:HB         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,882)         1:A:34:VAL:HB         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,882)         1:A:34:VAL:HB         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,801)         1:A:34:VAL:HB         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,801)         1:A:34:VAL:HB         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,801)         1:A:34:VAL:HB         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,720)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:109:LEU:HD11         3         0.17           (1,772)         1:A:29:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD21	(1,1047)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:46:ARG:HD2	13	0.18
(1,1047)         1:A:40:ALA:HB3         1:A:46:ARG:HD2         13         0.18           (1,1018)         1:A:38:TRP:HB2         1:A:39:SER:HB2         16         0.18           (1,919)         1:A:35:ASP:H         1:A:35:ASP:HB2         5         0.17           (1,888)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HA         5         0.17           (1,888)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HA         5         0.17           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HA         5         0.17           (1,882)         1:A:34:VAL:HB         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,882)         1:A:34:VAL:HB         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,882)         1:A:34:VAL:HB         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,801)         1:A:34:VAL:HB         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,801)         1:A:34:VAL:HB         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,801)         1:A:34:VAL:HB         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,720)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:109:LEU:HD11         3         0.17           (1,772)         1:A:29:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD21	, ,	1:A:40:ALA:HB2	1:A:46:ARG:HD2	13	0.18
(1,919)         1:A:35:ASP:H         1:A:35:ASP:HB2         5         0.17           (1,888)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HA         5         0.17           (1,888)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HA         5         0.17           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HA         5         0.17           (1,882)         1:A:34:VAL:HB         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,881)         1:A:34:VAL:HB         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,882)         1:A:34:VAL:HB         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,881)         1:A:34:VAL:HB         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,882)         1:A:34:VAL:HB         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,881)         1:A:34:VAL:HB         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,801)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:109:LEU:HD21         3         0.17           (1,772)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:109:LEU:HD21         3         0.17           (1,749)         1:A:28:GLN:HB2         1:A:109:LEU:HD21         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD22	(1,1047)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:46:ARG:HD2	13	0.18
(1,888)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HA         5         0.17           (1,888)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HA         5         0.17           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HA         5         0.17           (1,888)         1:A:34:VAL:HB         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,880)         1:A:34:VAL:HB         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,801)         1:A:34:VAL:HB         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,801)         1:A:34:VAL:HB         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,801)         1:A:34:VAL:HB         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,772)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:109:LEU:HD11         3         0.17           (1,772)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:109:LEU:HD23         3         0.17           (1,767)         1:A:29:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD21         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD22         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD23         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD21	(1,1018)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:39:SER:HB2	16	0.18
(1,888)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HA         5         0.17           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,882)         1:A:34:VAL:HB         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,801)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HG         6         0.17           (1,772)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:109:LEU:HD11         3         0.17           (1,772)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:109:LEU:HD12         3         0.17           (1,772)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:109:LEU:HD13         3         0.17           (1,772)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:109:LEU:HD13         3         0.17           (1,767)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD22         4         0.17           (1,749)         1:A:28:GLN:HB2         1:A:109:LEU:HD21         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD22         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD23         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD21         5         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:L	(1,919)	1:A:35:ASP:H	1:A:35:ASP:HB2	5	0.17
(1,888)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HA         5         0.17           (1,882)         1:A:34:VAL:HB         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,801)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HG         6         0.17           (1,772)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:109:LEU:HD11         3         0.17           (1,772)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:109:LEU:HD12         3         0.17           (1,772)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:109:LEU:HD13         3         0.17           (1,772)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:109:LEU:HD13         3         0.17           (1,767)         1:A:29:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD22         4         0.17           (1,749)         1:A:29:ARG:HB2         1:A:30:TYR:HD1         13         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD21         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD23         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD21         5         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD23         5         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:L	(1,888)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HA	5	0.17
(1,882)         1:A:34:VAL:HB         1:A:103:GLU:HG2         2         0.17           (1,801)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HG         6         0.17           (1,772)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:109:LEU:HD11         3         0.17           (1,772)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:109:LEU:HD12         3         0.17           (1,772)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:109:LEU:HD13         3         0.17           (1,772)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:109:LEU:HD13         3         0.17           (1,767)         1:A:29:ARG:HE         1:A:104:GLU:HG2         4         0.17           (1,749)         1:A:28:GLN:HB2         1:A:30:TYR:HD1         13         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD21         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD23         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD21         5         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD23         5         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD13         6         0.17           (1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LE	(1,888)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HA	5	0.17
(1,801)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HG         6         0.17           (1,772)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:109:LEU:HD11         3         0.17           (1,772)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:109:LEU:HD12         3         0.17           (1,772)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:109:LEU:HD13         3         0.17           (1,767)         1:A:29:ARG:HE         1:A:104:GLU:HG2         4         0.17           (1,749)         1:A:28:GLN:HB2         1:A:30:TYR:HD1         13         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD21         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD22         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD23         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD21         5         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD22         5         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD23         5         0.17           (1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD13         16         0.17           (1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109	(1,888)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HA	5	0.17
(1,772)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:109:LEU:HD11         3         0.17           (1,772)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:109:LEU:HD12         3         0.17           (1,772)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:109:LEU:HD13         3         0.17           (1,767)         1:A:29:ARG:HE         1:A:104:GLU:HG2         4         0.17           (1,749)         1:A:28:GLN:HB2         1:A:30:TYR:HD1         13         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD21         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD22         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD23         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD22         5         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD23         5         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD23         5         0.17           (1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD11         16         0.17           (1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD12         16         0.17           (1,720)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:	(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG2	2	0.17
(1,772)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:109:LEU:HD12         3         0.17           (1,772)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:109:LEU:HD13         3         0.17           (1,767)         1:A:29:ARG:HE         1:A:104:GLU:HG2         4         0.17           (1,749)         1:A:28:GLN:HB2         1:A:30:TYR:HD1         13         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD21         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD22         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD23         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD21         5         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD22         5         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD12         16         0.17           (1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD11         16         0.17           (1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD13         16         0.17           (1,720)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD13         16         0.17           (1,635)         1:A:27:ARG:HB2         1:	(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	6	0.17
(1,772)         1:A:29:ARG:HD2         1:A:109:LEU:HD13         3         0.17           (1,767)         1:A:29:ARG:HE         1:A:104:GLU:HG2         4         0.17           (1,749)         1:A:28:GLN:HB2         1:A:30:TYR:HD1         13         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD21         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD22         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD23         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD21         5         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD23         5         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD13         16         0.17           (1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD12         16         0.17           (1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD13         16         0.17           (1,720)         1:A:27:ARG:HE         1:A:111:GLU:HG2         11         0.17           (1,635)         1:A:25:ILE:HG12         1:A:113:GLU:HA         4         0.17           (1,427)         1:A:16:ILE:H         1:A:16:	(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD11	3	0.17
(1,767)         1:A:29:ARG:HE         1:A:104:GLU:HG2         4         0.17           (1,749)         1:A:28:GLN:HB2         1:A:30:TYR:HD1         13         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD21         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD22         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD23         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD21         5         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD23         5         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD23         5         0.17           (1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD11         16         0.17           (1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD12         16         0.17           (1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD13         16         0.17           (1,720)         1:A:27:ARG:HE         1:A:111:GLU:HG2         11         0.17           (1,635)         1:A:25:ILE:HG12         1:A:113:GLU:HA         4         0.17           (1,427)         1:A:16:ILE:H         1:A:16:	(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD12	3	0.17
(1,749)         1:A:28:GLN:HB2         1:A:30:TYR:HD1         13         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD21         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD22         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD23         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD21         5         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD23         5         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD13         5         0.17           (1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD11         16         0.17           (1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD12         16         0.17           (1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD13         16         0.17           (1,720)         1:A:27:ARG:HE         1:A:111:GLU:HG2         11         0.17           (1,635)         1:A:25:ILE:HG12         1:A:113:GLU:HA         4         0.17           (1,427)         1:A:16:ILE:H         1:A:16:ILE:HG21         7         0.17           (1,410)         1:A:14:ARG:HG2         1:A:16	(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD13	3	0.17
(1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD21         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD22         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD23         2         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD21         5         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD22         5         0.17           (1,732)         1:A:27:ARG:HG2         1:A:109:LEU:HD23         5         0.17           (1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD11         16         0.17           (1,727)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD12         16         0.17           (1,720)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:109:LEU:HD13         16         0.17           (1,720)         1:A:27:ARG:HB2         1:A:111:GLU:HG2         11         0.17           (1,635)         1:A:25:ILE:HG12         1:A:113:GLU:HA         4         0.17           (1,427)         1:A:16:ILE:H         1:A:16:ILE:HG21         7         0.17           (1,410)         1:A:14:ARG:HG2         1:A:16:ILE:HG22         7         0.17	(1,767)	1:A:29:ARG:HE	1:A:104:GLU:HG2	4	0.17
(1,732)       1:A:27:ARG:HG2       1:A:109:LEU:HD22       2       0.17         (1,732)       1:A:27:ARG:HG2       1:A:109:LEU:HD23       2       0.17         (1,732)       1:A:27:ARG:HG2       1:A:109:LEU:HD21       5       0.17         (1,732)       1:A:27:ARG:HG2       1:A:109:LEU:HD22       5       0.17         (1,732)       1:A:27:ARG:HG2       1:A:109:LEU:HD23       5       0.17         (1,727)       1:A:27:ARG:HB2       1:A:109:LEU:HD11       16       0.17         (1,727)       1:A:27:ARG:HB2       1:A:109:LEU:HD12       16       0.17         (1,727)       1:A:27:ARG:HB2       1:A:109:LEU:HD13       16       0.17         (1,720)       1:A:27:ARG:HB2       1:A:111:GLU:HG2       11       0.17         (1,635)       1:A:25:ILE:HG12       1:A:113:GLU:HA       4       0.17         (1,427)       1:A:16:ILE:H       1:A:17:PRO:HD2       20       0.17         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG21       7       0.17         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG22       7       0.17	(1,749)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HD1	13	0.17
(1,732)       1:A:27:ARG:HG2       1:A:109:LEU:HD23       2       0.17         (1,732)       1:A:27:ARG:HG2       1:A:109:LEU:HD21       5       0.17         (1,732)       1:A:27:ARG:HG2       1:A:109:LEU:HD22       5       0.17         (1,732)       1:A:27:ARG:HG2       1:A:109:LEU:HD23       5       0.17         (1,727)       1:A:27:ARG:HB2       1:A:109:LEU:HD11       16       0.17         (1,727)       1:A:27:ARG:HB2       1:A:109:LEU:HD12       16       0.17         (1,727)       1:A:27:ARG:HB2       1:A:109:LEU:HD13       16       0.17         (1,720)       1:A:27:ARG:HE       1:A:111:GLU:HG2       11       0.17         (1,635)       1:A:25:ILE:HG12       1:A:113:GLU:HA       4       0.17         (1,427)       1:A:16:ILE:H       1:A:17:PRO:HD2       20       0.17         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG21       7       0.17         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG22       7       0.17	(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD21	2	0.17
(1,732)       1:A:27:ARG:HG2       1:A:109:LEU:HD21       5       0.17         (1,732)       1:A:27:ARG:HG2       1:A:109:LEU:HD22       5       0.17         (1,732)       1:A:27:ARG:HG2       1:A:109:LEU:HD23       5       0.17         (1,727)       1:A:27:ARG:HB2       1:A:109:LEU:HD11       16       0.17         (1,727)       1:A:27:ARG:HB2       1:A:109:LEU:HD12       16       0.17         (1,727)       1:A:27:ARG:HB2       1:A:109:LEU:HD13       16       0.17         (1,720)       1:A:27:ARG:HE       1:A:111:GLU:HG2       11       0.17         (1,635)       1:A:25:ILE:HG12       1:A:113:GLU:HA       4       0.17         (1,427)       1:A:16:ILE:H       1:A:17:PRO:HD2       20       0.17         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG21       7       0.17         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG22       7       0.17	(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD22	2	0.17
(1,732)       1:A:27:ARG:HG2       1:A:109:LEU:HD22       5       0.17         (1,732)       1:A:27:ARG:HG2       1:A:109:LEU:HD23       5       0.17         (1,727)       1:A:27:ARG:HB2       1:A:109:LEU:HD11       16       0.17         (1,727)       1:A:27:ARG:HB2       1:A:109:LEU:HD12       16       0.17         (1,727)       1:A:27:ARG:HB2       1:A:109:LEU:HD13       16       0.17         (1,720)       1:A:27:ARG:HE       1:A:111:GLU:HG2       11       0.17         (1,635)       1:A:25:ILE:HG12       1:A:113:GLU:HA       4       0.17         (1,427)       1:A:16:ILE:H       1:A:17:PRO:HD2       20       0.17         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG21       7       0.17         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG22       7       0.17	(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD23	2	0.17
(1,732)       1:A:27:ARG:HG2       1:A:109:LEU:HD23       5       0.17         (1,727)       1:A:27:ARG:HB2       1:A:109:LEU:HD11       16       0.17         (1,727)       1:A:27:ARG:HB2       1:A:109:LEU:HD12       16       0.17         (1,727)       1:A:27:ARG:HB2       1:A:109:LEU:HD13       16       0.17         (1,720)       1:A:27:ARG:HE       1:A:111:GLU:HG2       11       0.17         (1,635)       1:A:25:ILE:HG12       1:A:113:GLU:HA       4       0.17         (1,427)       1:A:16:ILE:H       1:A:17:PRO:HD2       20       0.17         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG21       7       0.17         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG22       7       0.17	(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD21	5	0.17
(1,732)       1:A:27:ARG:HG2       1:A:109:LEU:HD23       5       0.17         (1,727)       1:A:27:ARG:HB2       1:A:109:LEU:HD11       16       0.17         (1,727)       1:A:27:ARG:HB2       1:A:109:LEU:HD12       16       0.17         (1,727)       1:A:27:ARG:HB2       1:A:109:LEU:HD13       16       0.17         (1,720)       1:A:27:ARG:HE       1:A:111:GLU:HG2       11       0.17         (1,635)       1:A:25:ILE:HG12       1:A:113:GLU:HA       4       0.17         (1,427)       1:A:16:ILE:H       1:A:17:PRO:HD2       20       0.17         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG21       7       0.17         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG22       7       0.17	(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD22	5	0.17
(1,727)       1:A:27:ARG:HB2       1:A:109:LEU:HD11       16       0.17         (1,727)       1:A:27:ARG:HB2       1:A:109:LEU:HD12       16       0.17         (1,727)       1:A:27:ARG:HB2       1:A:109:LEU:HD13       16       0.17         (1,720)       1:A:27:ARG:HE       1:A:111:GLU:HG2       11       0.17         (1,635)       1:A:25:ILE:HG12       1:A:113:GLU:HA       4       0.17         (1,427)       1:A:16:ILE:H       1:A:17:PRO:HD2       20       0.17         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG21       7       0.17         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG22       7       0.17		1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD23	5	0.17
(1,727)       1:A:27:ARG:HB2       1:A:109:LEU:HD12       16       0.17         (1,727)       1:A:27:ARG:HB2       1:A:109:LEU:HD13       16       0.17         (1,720)       1:A:27:ARG:HE       1:A:111:GLU:HG2       11       0.17         (1,635)       1:A:25:ILE:HG12       1:A:113:GLU:HA       4       0.17         (1,427)       1:A:16:ILE:H       1:A:17:PRO:HD2       20       0.17         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG21       7       0.17         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG22       7       0.17		1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD11	16	0.17
(1,727)       1:A:27:ARG:HB2       1:A:109:LEU:HD13       16       0.17         (1,720)       1:A:27:ARG:HE       1:A:111:GLU:HG2       11       0.17         (1,635)       1:A:25:ILE:HG12       1:A:113:GLU:HA       4       0.17         (1,427)       1:A:16:ILE:H       1:A:17:PRO:HD2       20       0.17         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG21       7       0.17         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG22       7       0.17		1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD12	16	0.17
(1,635)       1:A:25:ILE:HG12       1:A:113:GLU:HA       4       0.17         (1,427)       1:A:16:ILE:H       1:A:17:PRO:HD2       20       0.17         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG21       7       0.17         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG22       7       0.17	` ′	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD13	16	0.17
(1,427)       1:A:16:ILE:H       1:A:17:PRO:HD2       20       0.17         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG21       7       0.17         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG22       7       0.17	(1,720)	1:A:27:ARG:HE	1:A:111:GLU:HG2	11	0.17
(1,427)       1:A:16:ILE:H       1:A:17:PRO:HD2       20       0.17         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG21       7       0.17         (1,410)       1:A:14:ARG:HG2       1:A:16:ILE:HG22       7       0.17	(1,635)	1:A:25:ILE:HG12	1:A:113:GLU:HA	4	0.17
(1,410) 1:A:14:ARG:HG2 1:A:16:ILE:HG22 7 0.17		1:A:16:ILE:H	1:A:17:PRO:HD2	20	0.17
	(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG21	7	0.17
	(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG22	7	0.17
(1,110)   1.11.11.11.11.00.11.02   1.11.10.111.11.020   1   0.11	(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG23	7	0.17



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,29)	1:A:29:ARG:H	1:A:6:ALA:O	15	0.17
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD11	3	0.17
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD12	3	0.17
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD13	3	0.17
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD11	11	0.17
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD12	11	0.17
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD13	11	0.17
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD11	20	0.17
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD12	20	0.17
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD13	20	0.17
(1,2654)	1:A:176:ALA:H	1:A:177:LEU:HB2	8	0.17
(1,2593)	1:A:172:GLU:H	1:A:172:GLU:HB2	10	0.17
(1,2557)	1:A:166:ILE:HG21	1:A:167:SER:HB2	17	0.17
(1,2557)	1:A:166:ILE:HG22	1:A:167:SER:HB2	17	0.17
(1,2557)	1:A:166:ILE:HG23	1:A:167:SER:HB2	17	0.17
(1,2512)	1:A:164:MET:HB2	1:A:167:SER:H	19	0.17
(1,2510)	1:A:164:MET:HA	1:A:167:SER:HB2	17	0.17
(1,2507)	1:A:164:MET:H	1:A:164:MET:HG2	10	0.17
(1,2506)	1:A:164:MET:H	1:A:164:MET:HB2	2	0.17
(1,2492)	1:A:163:MET:H	1:A:164:MET:HG2	10	0.17
(1,2462)	1:A:158:GLU:HG2	1:A:159:PRO:HD2	18	0.17
(1,2449)	1:A:157:PHE:H	1:A:157:PHE:HB2	8	0.17
(1,2449)	1:A:157:PHE:H	1:A:157:PHE:HB2	19	0.17
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB1	11	0.17
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB2	11	0.17
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB3	11	0.17
(1,2415)	1:A:151:GLU:H	1:A:152:ASP:H	8	0.17
(1,2410)	1:A:150:PRO:HB2	1:A:151:GLU:H	5	0.17
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:150:PRO:HD2	13	0.17
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:150:PRO:HD2	13	0.17
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:150:PRO:HD2	13	0.17
(1,2386)	1:A:147:GLY:H	1:A:148:PRO:HD2	13	0.17
(1,2383)	1:A:145:PRO:HB2	1:A:146:GLY:H	10	0.17
(1,2380)	1:A:144:LEU:HB2	1:A:145:PRO:HD2	18	0.17
(1,2363)	1:A:142:GLY:H	1:A:143:ASP:H	19	0.17
(1,2359)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:141:ARG:HD2	11	0.17
(1,2359)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:141:ARG:HD2	13	0.17
(1,2329)	1:A:139:PHE:HB3	1:A:144:LEU:HD11	7	0.17
(1,2329)	1:A:139:PHE:HB3	1:A:144:LEU:HD12	7	0.17
(1,2329)	1:A:139:PHE:HB3	1:A:144:LEU:HD13	7	0.17
(1,232)	1:A:8:GLU:HB2	1:A:27:ARG:H	16	0.17
(1,2274)	1:A:135:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HD11	6	0.17



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2274)	1:A:135:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HD12	6	0.17
(1,2274)	1:A:135:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HD13	6	0.17
(1,2274)	1:A:135:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HD11	6	0.17
(1,2274)	1:A:135:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HD12	6	0.17
(1,2274)	1:A:135:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HD13	6	0.17
(1,2126)	1:A:123:VAL:HG21	1:A:179:HIS:HD2	20	0.17
(1,2126)	1:A:123:VAL:HG22	1:A:179:HIS:HD2	20	0.17
(1,2126)	1:A:123:VAL:HG23	1:A:179:HIS:HD2	20	0.17
(1,1999)	1:A:116:THR:HG21	1:A:121:MET:HB2	15	0.17
(1,1999)	1:A:116:THR:HG22	1:A:121:MET:HB2	15	0.17
(1,1999)	1:A:116:THR:HG23	1:A:121:MET:HB2	15	0.17
(1,196)	1:A:5:GLN:HA	1:A:6:ALA:H	3	0.17
(1,194)	1:A:5:GLN:H	1:A:5:GLN:HG2	4	0.17
(1,193)	1:A:5:GLN:H	1:A:5:GLN:HB2	4	0.17
(1,193)	1:A:5:GLN:H	1:A:5:GLN:HB2	8	0.17
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HB2	11	0.17
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HB2	11	0.17
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HB2	11	0.17
(1,1865)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD11	2	0.17
(1,1865)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD12	2	0.17
(1,1865)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD13	2	0.17
(1,175)	1:A:171:GLY:H	1:A:167:SER:O	8	0.17
(1,1722)	1:A:94:ASP:H	1:A:94:ASP:HB2	5	0.17
(1,1706)	1:A:92:LYS:H	1:A:92:LYS:HD2	15	0.17
(1,1689)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:121:MET:HE1	6	0.17
(1,1689)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:121:MET:HE2	6	0.17
(1,1689)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:121:MET:HE3	6	0.17
(1,1683)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:90:GLU:H	14	0.17
(1,1680)		1:A:92:LYS:HD2	8	0.17
(1,1678)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:H	16	0.17
(1,1543)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:82:ARG:H	5	0.17
(1,1507)	1:A:75:LEU:HD21	1:A:86:SER:HB2	17	0.17
(1,1507)	1:A:75:LEU:HD22	1:A:86:SER:HB2	17	0.17
(1,1507)	1:A:75:LEU:HD23	1:A:86:SER:HB2	17	0.17
(1,1475)	1:A:74:ILE:HD11	1:A:75:LEU:H	14	0.17
(1,1475)	1:A:74:ILE:HD12	1:A:75:LEU:H	14	0.17
(1,1475)	1:A:74:ILE:HD13	1:A:75:LEU:H	14	0.17
(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	10	0.17
(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	15	0.17
(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	20	0.17
(1,1319)	1:A:59:ARG:HG2	1:A:59:ARG:HE	7	0.17
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:56:GLY:H	6	0.17



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1243)	1:A:53:GLU:H	1:A:54:PRO:HD2	2	0.17
(1,1222)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:69:ASN:HA	10	0.17
(1,1222)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:69:ASN:HA	10	0.17
(1,1222)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:69:ASN:HA	10	0.17
(1,1203)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:129:TRP:HZ3	10	0.17
(1,1165)	1:A:49:ARG:HB2	1:A:49:ARG:HD2	8	0.17
(1,11)	1:A:19:GLY:H	1:A:16:ILE:O	12	0.17
(1,103)	1:A:104:GLU:H	1:A:107:GLY:O	1	0.17
(1,101)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:O	15	0.17
(1,895)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:HB2	3	0.16
(1,895)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:HB2	3	0.16
(1,895)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:HB2	3	0.16
(1,822)	1:A:31:ASP:H	1:A:31:ASP:HB2	7	0.16
(1,775)	1:A:29:ARG:HG2	1:A:29:ARG:HE	14	0.16
(1,766)	1:A:29:ARG:HE	1:A:104:GLU:HB2	17	0.16
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD21	4	0.16
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD22	4	0.16
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD23	4	0.16
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD21	17	0.16
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD22	17	0.16
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD23	17	0.16
(1,600)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:174:TRP:HZ3	10	0.16
(1,559)	1:A:24:ILE:H	1:A:113:GLU:HG2	14	0.16
(1,493)	1:A:20:GLU:H	1:A:20:GLU:HB2	14	0.16
(1,427)	1:A:16:ILE:H	1:A:17:PRO:HD2	10	0.16
(1,427)	1:A:16:ILE:H	1:A:17:PRO:HD2	11	0.16
(1,39)	1:A:40:ALA:H	1:A:36:GLU:O	1	0.16
(1,388)	1:A:14:ARG:H	1:A:22:ARG:HG2	6	0.16
(1,324)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HB2	5	0.16
(1,324)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HB2	5	0.16
(1,324)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HB2	5	0.16
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD11	9	0.16
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD12	9	0.16
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD13	9	0.16
(1,270)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:174:TRP:HA	14	0.16
(1,2654)	1:A:176:ALA:H	1:A:177:LEU:HB2	1	0.16
(1,2593)	1:A:172:GLU:H	1:A:172:GLU:HB2	17	0.16
(1,2557)	1:A:166:ILE:HG21	1:A:167:SER:HB2	13	0.16
(1,2557)	1:A:166:ILE:HG22	1:A:167:SER:HB2	13	0.16
(1,2557)	1:A:166:ILE:HG23	1:A:167:SER:HB2	13	0.16
(1,2529)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:166:ILE:H	17	0.16
(1,2502)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HD11	19	0.16



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

(1,2502)         1:A:163:MET:HE1         1:A:166:ILE:HD12         19         0.16           (1,2502)         1:A:163:MET:HE1         1:A:166:ILE:HD13         19         0.16           (1,2502)         1:A:163:MET:HE2         1:A:166:ILE:HD11         19         0.16           (1,2502)         1:A:163:MET:HE2         1:A:166:ILE:HD12         19         0.16           (1,2502)         1:A:163:MET:HE3         1:A:166:ILE:HD13         19         0.16           (1,2502)         1:A:163:MET:HE3         1:A:166:ILE:HD11         19         0.16           (1,2502)         1:A:163:MET:HE3         1:A:166:ILE:HD12         19         0.16           (1,2502)         1:A:163:MET:HE3         1:A:166:ILE:HD13         19         0.16           (1,2403)         1:A:163:MET:HE3         1:A:156:ILE:HD13         19         0.16           (1,2403)	(Å)
(1,2502)         1:A:163:MET:HE2         1:A:166:ILE:HD11         19         0.16           (1,2502)         1:A:163:MET:HE2         1:A:166:ILE:HD12         19         0.16           (1,2502)         1:A:163:MET:HE2         1:A:166:ILE:HD13         19         0.16           (1,2502)         1:A:163:MET:HE3         1:A:166:ILE:HD11         19         0.16           (1,2502)         1:A:163:MET:HE3         1:A:166:ILE:HD12         19         0.16           (1,2502)         1:A:163:MET:HE3         1:A:166:ILE:HD13         19         0.16           (1,2403)         1:A:163:MET:HE3         1:A:150:PRO:HD2         9         0.16           (1,2403)         1:A:149:VAL:HG13         1:A:150:PRO:HD2         16         0.16           (1,2403)         <	
(1,2502)         1:A:163:MET:HE2         1:A:166:ILE:HD12         19         0.16           (1,2502)         1:A:163:MET:HE2         1:A:166:ILE:HD13         19         0.16           (1,2502)         1:A:163:MET:HE3         1:A:166:ILE:HD11         19         0.16           (1,2502)         1:A:163:MET:HE3         1:A:166:ILE:HD12         19         0.16           (1,2502)         1:A:163:MET:HE3         1:A:166:ILE:HD13         19         0.16           (1,2403)         1:A:163:MET:HE3         1:A:155:GLU:HG2         9         0.16           (1,2403)         1:A:149:VAL:HG11         1:A:150:PRO:HD2         16         0.16           (1,2403)         1:A:149:VAL:HG13         1:A:150:PRO:HD2         16         0.16           (1,2403)         1:A:131:MET:HE1         1:A:167:SER:HB2         17         0.16           (1,2230) <t< td=""><td></td></t<>	
(1,2502)         1:A:163:MET:HE2         1:A:166:ILE:HD13         19         0.16           (1,2502)         1:A:163:MET:HE3         1:A:166:ILE:HD11         19         0.16           (1,2502)         1:A:163:MET:HE3         1:A:166:ILE:HD12         19         0.16           (1,2502)         1:A:163:MET:HE3         1:A:166:ILE:HD13         19         0.16           (1,2502)         1:A:163:MET:HE3         1:A:166:ILE:HD13         19         0.16           (1,2441)         1:A:163:MET:HE3         1:A:166:ILE:HD13         19         0.16           (1,2441)         1:A:163:MET:HE3         1:A:166:ILE:HD13         19         0.16           (1,2441)         1:A:163:MET:HE3         1:A:155:GLU:HG2         9         0.16           (1,2443)         1:A:155:CBU:HG2         9         0.16           (1,2403)         1:A:149:VAL:HG11         1:A:150:PRO:HD2         16         0.16           (1,2403)         1:A:149:VAL:HG13         1:A:167:SER:HB2         17         0.16           (1,2230)         1:A:131:MET:HE1         1:A:167:SER:HB2         17         0.16           (1,2230)         1:A:131:MET:HE3         1:A:167:SER:HB2         17         0.16           (1,2069)         1:A:121:MET:HG2         1	
(1,2502)         1:A:163:MET:HE3         1:A:166:ILE:HD11         19         0.16           (1,2502)         1:A:163:MET:HE3         1:A:166:ILE:HD12         19         0.16           (1,2502)         1:A:163:MET:HE3         1:A:166:ILE:HD13         19         0.16           (1,2441)         1:A:155:GLU:HA         1:A:155:GLU:HG2         9         0.16           (1,2443)         1:A:150:PRO:HG2         1:A:152:ASP:H         15         0.16           (1,2403)         1:A:149:VAL:HG11         1:A:150:PRO:HD2         16         0.16           (1,2403)         1:A:149:VAL:HG12         1:A:150:PRO:HD2         16         0.16           (1,2403)         1:A:149:VAL:HG13         1:A:150:PRO:HD2         16         0.16           (1,2403)         1:A:149:VAL:HG13         1:A:150:PRO:HD2         16         0.16           (1,2230)         1:A:131:MET:HE1         1:A:167:SER:HB2         17         0.16           (1,2230)         1:A:131:MET:HE2         1:A:167:SER:HB2         17         0.16           (1,2030)         1:A:121:MET:HG2         1:A:125:VAL:HG21         7         0.16           (1,2069)         1:A:121:MET:HG2         1:A:125:VAL:HG22         7         0.16           (1,2069)         1:A:1	
(1,2502)         1:A:163:MET:HE3         1:A:166:ILE:HD12         19         0.16           (1,2502)         1:A:163:MET:HE3         1:A:166:ILE:HD13         19         0.16           (1,2441)         1:A:155:GLU:HA         1:A:155:GLU:HG2         9         0.16           (1,2413)         1:A:150:PRO:HG2         1:A:152:ASP:H         15         0.16           (1,2403)         1:A:149:VAL:HG11         1:A:150:PRO:HD2         16         0.16           (1,2403)         1:A:149:VAL:HG12         1:A:150:PRO:HD2         16         0.16           (1,2403)         1:A:149:VAL:HG13         1:A:150:PRO:HD2         16         0.16           (1,2403)         1:A:149:VAL:HG13         1:A:150:PRO:HD2         16         0.16           (1,2403)         1:A:131:MET:HE1         1:A:167:SER:HB2         17         0.16           (1,2230)         1:A:131:MET:HE2         1:A:167:SER:HB2         17         0.16           (1,2230)         1:A:131:MET:HE3         1:A:167:SER:HB2         17         0.16           (1,2069)         1:A:121:MET:HG2         1:A:125:VAL:HG21         7         0.16           (1,2069)         1:A:121:MET:HG2         1:A:125:VAL:HG23         7         0.16           (1,2047)         1:A:19	
(1,2502)         1:A:163:MET:HE3         1:A:166:ILE:HD13         19         0.16           (1,2441)         1:A:155:GLU:HA         1:A:155:GLU:HG2         9         0.16           (1,2413)         1:A:150:PRO:HG2         1:A:152:ASP:H         15         0.16           (1,2403)         1:A:149:VAL:HG11         1:A:150:PRO:HD2         16         0.16           (1,2403)         1:A:149:VAL:HG12         1:A:150:PRO:HD2         16         0.16           (1,2403)         1:A:149:VAL:HG13         1:A:150:PRO:HD2         16         0.16           (1,2403)         1:A:131:MET:HE1         1:A:167:SER:HB2         17         0.16           (1,2230)         1:A:131:MET:HE2         1:A:167:SER:HB2         17         0.16           (1,2230)         1:A:131:MET:HE3         1:A:167:SER:HB2         17         0.16           (1,2069)         1:A:121:MET:HG2         1:A:125:VAL:HG21         7         0.16           (1,2069)         1:A:121:MET:HG2         1:A:125:VAL:HG22         7         0.16           (1,2047)         1:A:120:GLN:HA         1:A:120:GLN:HE21         14         0.16           (1,2042)         1:A:119:GLU:HG2         1:A:178:VAL:HG12         12         0.16           (1,2042)         1:A:119	
(1,2441)         1:A:155:GLU:HA         1:A:155:GLU:HG2         9         0.16           (1,2413)         1:A:150:PRO:HG2         1:A:152:ASP:H         15         0.16           (1,2403)         1:A:149:VAL:HG11         1:A:150:PRO:HD2         16         0.16           (1,2403)         1:A:149:VAL:HG12         1:A:150:PRO:HD2         16         0.16           (1,2403)         1:A:149:VAL:HG13         1:A:150:PRO:HD2         16         0.16           (1,2403)         1:A:131:MET:HE1         1:A:167:SER:HB2         17         0.16           (1,2230)         1:A:131:MET:HE2         1:A:167:SER:HB2         17         0.16           (1,2230)         1:A:131:MET:HE3         1:A:167:SER:HB2         17         0.16           (1,2030)         1:A:131:MET:HE3         1:A:167:SER:HB2         17         0.16           (1,2069)         1:A:121:MET:HG2         1:A:125:VAL:HG21         7         0.16           (1,2069)         1:A:121:MET:HG2         1:A:125:VAL:HG23         7         0.16           (1,2047)         1:A:120:GLN:HA         1:A:120:GLN:HE21         14         0.16           (1,2042)         1:A:119:GLU:HG2         1:A:178:VAL:HG12         12         0.16           (1,2042)         1:A:119:	
(1,2413)         1:A:150:PRO:HG2         1:A:152:ASP:H         15         0.16           (1,2403)         1:A:149:VAL:HG11         1:A:150:PRO:HD2         16         0.16           (1,2403)         1:A:149:VAL:HG12         1:A:150:PRO:HD2         16         0.16           (1,2403)         1:A:149:VAL:HG13         1:A:150:PRO:HD2         16         0.16           (1,2403)         1:A:131:MET:HE1         1:A:167:SER:HB2         17         0.16           (1,2230)         1:A:131:MET:HE2         1:A:167:SER:HB2         17         0.16           (1,2230)         1:A:131:MET:HE3         1:A:167:SER:HB2         17         0.16           (1,2030)         1:A:131:MET:HE3         1:A:167:SER:HB2         17         0.16           (1,2069)         1:A:121:MET:HG2         1:A:125:VAL:HG21         7         0.16           (1,2069)         1:A:121:MET:HG2         1:A:125:VAL:HG22         7         0.16           (1,2049)         1:A:120:GLN:HA         1:A:120:GLN:HE21         14         0.16           (1,2042)         1:A:119:GLU:HG2         1:A:178:VAL:HG11         12         0.16           (1,2042)         1:A:119:GLU:HG2         1:A:178:VAL:HG13         12         0.16	
(1,2403)       1:A:149:VAL:HG11       1:A:150:PRO:HD2       16       0.16         (1,2403)       1:A:149:VAL:HG12       1:A:150:PRO:HD2       16       0.16         (1,2403)       1:A:149:VAL:HG13       1:A:150:PRO:HD2       16       0.16         (1,2403)       1:A:131:MET:HE1       1:A:167:SER:HB2       17       0.16         (1,2230)       1:A:131:MET:HE2       1:A:167:SER:HB2       17       0.16         (1,2230)       1:A:131:MET:HE3       1:A:167:SER:HB2       17       0.16         (1,2230)       1:A:131:MET:HE3       1:A:167:SER:HB2       17       0.16         (1,2069)       1:A:121:MET:HG2       1:A:125:VAL:HG21       7       0.16         (1,2069)       1:A:121:MET:HG2       1:A:125:VAL:HG22       7       0.16         (1,2069)       1:A:121:MET:HG2       1:A:125:VAL:HG23       7       0.16         (1,2047)       1:A:120:GLN:HA       1:A:120:GLN:HE21       14       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG11       12       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG13       12       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG13       12       0.16	
(1,2403)       1:A:149:VAL:HG12       1:A:150:PRO:HD2       16       0.16         (1,2403)       1:A:149:VAL:HG13       1:A:150:PRO:HD2       16       0.16         (1,2230)       1:A:131:MET:HE1       1:A:167:SER:HB2       17       0.16         (1,2230)       1:A:131:MET:HE2       1:A:167:SER:HB2       17       0.16         (1,2230)       1:A:131:MET:HE3       1:A:167:SER:HB2       17       0.16         (1,2069)       1:A:121:MET:HG2       1:A:125:VAL:HG21       7       0.16         (1,2069)       1:A:121:MET:HG2       1:A:125:VAL:HG22       7       0.16         (1,2069)       1:A:121:MET:HG2       1:A:125:VAL:HG23       7       0.16         (1,2047)       1:A:120:GLN:HA       1:A:120:GLN:HE21       14       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG11       12       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG12       12       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG13       12       0.16	
(1,2403)         1:A:149:VAL:HG13         1:A:150:PRO:HD2         16         0.16           (1,2230)         1:A:131:MET:HE1         1:A:167:SER:HB2         17         0.16           (1,2230)         1:A:131:MET:HE2         1:A:167:SER:HB2         17         0.16           (1,2230)         1:A:131:MET:HE3         1:A:167:SER:HB2         17         0.16           (1,2069)         1:A:121:MET:HG2         1:A:125:VAL:HG21         7         0.16           (1,2069)         1:A:121:MET:HG2         1:A:125:VAL:HG22         7         0.16           (1,2069)         1:A:121:MET:HG2         1:A:125:VAL:HG23         7         0.16           (1,2047)         1:A:120:GLN:HA         1:A:120:GLN:HE21         14         0.16           (1,2042)         1:A:119:GLU:HG2         1:A:178:VAL:HG11         12         0.16           (1,2042)         1:A:119:GLU:HG2         1:A:178:VAL:HG13         12         0.16           (1,2042)         1:A:119:GLU:HG2         1:A:178:VAL:HG13         12         0.16	
(1,2230)       1:A:131:MET:HE1       1:A:167:SER:HB2       17       0.16         (1,2230)       1:A:131:MET:HE2       1:A:167:SER:HB2       17       0.16         (1,2230)       1:A:131:MET:HE3       1:A:167:SER:HB2       17       0.16         (1,2069)       1:A:121:MET:HG2       1:A:125:VAL:HG21       7       0.16         (1,2069)       1:A:121:MET:HG2       1:A:125:VAL:HG22       7       0.16         (1,2069)       1:A:121:MET:HG2       1:A:125:VAL:HG23       7       0.16         (1,2047)       1:A:120:GLN:HA       1:A:120:GLN:HE21       14       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG11       12       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG12       12       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG13       12       0.16	
(1,2230)       1:A:131:MET:HE2       1:A:167:SER:HB2       17       0.16         (1,2230)       1:A:131:MET:HE3       1:A:167:SER:HB2       17       0.16         (1,2069)       1:A:121:MET:HG2       1:A:125:VAL:HG21       7       0.16         (1,2069)       1:A:121:MET:HG2       1:A:125:VAL:HG22       7       0.16         (1,2069)       1:A:121:MET:HG2       1:A:125:VAL:HG23       7       0.16         (1,2047)       1:A:120:GLN:HA       1:A:120:GLN:HE21       14       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG11       12       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG12       12       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG13       12       0.16	
(1,2230)       1:A:131:MET:HE3       1:A:167:SER:HB2       17       0.16         (1,2069)       1:A:121:MET:HG2       1:A:125:VAL:HG21       7       0.16         (1,2069)       1:A:121:MET:HG2       1:A:125:VAL:HG22       7       0.16         (1,2069)       1:A:121:MET:HG2       1:A:125:VAL:HG23       7       0.16         (1,2047)       1:A:120:GLN:HA       1:A:120:GLN:HE21       14       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG11       12       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG12       12       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG13       12       0.16	
(1,2069)       1:A:121:MET:HG2       1:A:125:VAL:HG21       7       0.16         (1,2069)       1:A:121:MET:HG2       1:A:125:VAL:HG22       7       0.16         (1,2069)       1:A:121:MET:HG2       1:A:125:VAL:HG23       7       0.16         (1,2047)       1:A:120:GLN:HA       1:A:120:GLN:HE21       14       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG11       12       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG12       12       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG13       12       0.16	
(1,2069)       1:A:121:MET:HG2       1:A:125:VAL:HG22       7       0.16         (1,2069)       1:A:121:MET:HG2       1:A:125:VAL:HG23       7       0.16         (1,2047)       1:A:120:GLN:HA       1:A:120:GLN:HE21       14       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG11       12       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG12       12       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG13       12       0.16	
(1,2069)       1:A:121:MET:HG2       1:A:125:VAL:HG23       7       0.16         (1,2047)       1:A:120:GLN:HA       1:A:120:GLN:HE21       14       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG11       12       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG12       12       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG13       12       0.16	
(1,2047)       1:A:120:GLN:HA       1:A:120:GLN:HE21       14       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG11       12       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG12       12       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG13       12       0.16	
(1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG11       12       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG12       12       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG13       12       0.16	-
(1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG12       12       0.16         (1,2042)       1:A:119:GLU:HG2       1:A:178:VAL:HG13       12       0.16	
(1,2042) 1:A:119:GLU:HG2 1:A:178:VAL:HG13 12 0.16	
(1,1922)   1:A:110:LEU:HD11   1:A:133:LEU:HB2   6   0.16	
(1,1922) 1:A:110:LEU:HD12 1:A:133:LEU:HB2 6 0.16	
(1,1922) 1:A:110:LEU:HD13 1:A:133:LEU:HB2 6 0.16	
(1,1862) 1:A:104:GLU:HB2 1:A:108:THR:HA 5 0.16	
(1,1859) 1:A:104:GLU:HA 1:A:107:GLY:H 13 0.16	
(1,1848) 1:A:103:GLU:HG3 1:A:104:GLU:H 4 0.16	
(1,1815) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:102:SER:HB2 7 0.16	
(1,1815) 1:A:101:LEU:HD22 1:A:102:SER:HB2 7 0.16	
(1,1815) 1:A:101:LEU:HD23 1:A:102:SER:HB2 7 0.16	
(1,1815) 1:A:101:LEU:HD21 1:A:102:SER:HB2 10 0.16	
(1,1815) 1:A:101:LEU:HD22 1:A:102:SER:HB2 10 0.16	
(1,1815) 1:A:101:LEU:HD23 1:A:102:SER:HB2 10 0.16	
(1,1703) 1:A:90:GLU:HG2 1:A:91:GLY:H 8 0.16	
(1,1690) 1:A:89:TYR:HE1 1:A:90:GLU:HB2 2 0.16	
(1,1650) 1:A:87:TRP:HE3 1:A:121:MET:HE1 17 0.16	
(1,1650) 1:A:87:TRP:HE3 1:A:121:MET:HE2 17 0.16	
(1,1650) 1:A:87:TRP:HE3 1:A:121:MET:HE3 17 0.16	
(1,1610) 1:A:85:ILE:H 1:A:98:GLU:HB2 6 0.16	
(1,1568) 1:A:82:ARG:HB2 1:A:82:ARG:HD2 12 0.16	



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

(1,15) 1:A:22:ARG:H 1:A:116:THR:O 18 0.16 (1,1426) 1:A:71:SER:HB2 1:A:88:VAL:HB 2 0.16 (1,1426) 1:A:70:ALA:H 1:A:89:TYR:HD1 10 0.16 (1,1419) 1:A:69:ASN:HA 1:A:89:TYR:HD1 7 0.16 (1,1413) 1:A:67:GLN:HG2 1:A:68:GLY:H 4 0.16 (1,1413) 1:A:67:GLN:HG2 1:A:68:GLY:H 4 0.16 (1,1413) 1:A:67:GLN:HG2 1:A:68:GLY:H 13 0.16 (1,137) 1:A:130:GLU:H 1:A:126:GLY:O 11 0.16 (1,137) 1:A:130:GLU:H 1:A:126:GLY:O 16 0.16 (1,138) 1:A:60:GLU:HG3 1:A:61:GLY:H 10 0.16 (1,1328) 1:A:60:GLU:HG3 1:A:61:GLY:H 10 0.16 (1,1328) 1:A:52:ILE:HG21 1:A:68:GLY:H 6 0.16 (1,1239) 1:A:52:ILE:HG21 1:A:68:GLY:H 6 0.16 (1,1239) 1:A:52:ILE:HG22 1:A:68:GLY:H 6 0.16 (1,1239) 1:A:52:ILE:HG23 1:A:68:GLY:H 6 0.16 (1,1239) 1:A:52:ILE:HG23 1:A:68:GLY:H 6 0.16 (1,1134) 1:A:44:A8RG:HB2 1:A:49:ARG:HB2 1:A:49:ARG:HB3 1:A:	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1426)         1:A:70:ALA:H         1:A:89:TYR:HD1         10         0.16           (1,1419)         1:A:69:ASN:HA         1:A:89:TYR:HD1         7         0.16           (1,1413)         1:A:67:GLN:HG2         1:A:68:GLY:H         4         0.16           (1,1413)         1:A:67:GLN:HG2         1:A:68:GLY:H         13         0.16           (1,137)         1:A:130:GLU:H         1:A:126:GLY:O         16         0.16           (1,137)         1:A:130:GLU:HG3         1:A:61:GLY:H         10         0.16           (1,1328)         1:A:60:GLU:HG3         1:A:61:GLY:H         10         0.16           (1,1239)         1:A:52:ILE:HG21         1:A:68:GLY:H         6         0.16           (1,1239)         1:A:52:ILE:HG22         1:A:68:GLY:H         6         0.16           (1,1239)         1:A:50:TRP:HE3         1:A:48:GSLY:H         6         0.16           (1,1239)         1:A:50:TRP:HE3         1:A:48:ASCHD2         11         0.16           (1,1153)         1:A:48:ASN:HB2         1:A:49:ARG:HD2         11         0.16           (1,1165)         1:A:49:ARG:HB2         1:A:49:ARG:HD2         11         0.16           (1,1162)         1:A:46:ARG:HG2         1:A:47:ILE:H	(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	18	0.16
(1,1419)         1:A:69:ASN:HA         1:A:68:GIV:H         4         0.16           (1,1413)         1:A:67:GLN:HG2         1:A:68:GLV:H         4         0.16           (1,143)         1:A:67:GLN:HG2         1:A:68:GLV:H         13         0.16           (1,137)         1:A:130:GLU:H         1:A:126:GLY:O         16         0.16           (1,137)         1:A:130:GLU:HG3         1:A:61:GLY:H         10         0.16           (1,1328)         1:A:60:GLU:HG3         1:A:61:GLY:H         10         0.16           (1,1329)         1:A:52:ILE:HG21         1:A:68:GLY:H         6         0.16           (1,1239)         1:A:52:ILE:HG22         1:A:68:GLY:H         6         0.16           (1,1239)         1:A:52:ILE:HG23         1:A:68:GLY:H         6         0.16           (1,1239)         1:A:52:ILE:HG23         1:A:68:GLY:H         6         0.16           (1,1239)         1:A:45:2ILE:HG23         1:A:68:GLY:H         6         0.16           (1,1239)         1:A:45:2ILE:HG23         1:A:68:GLY:H         6         0.16           (1,1239)         1:A:45:ASRSHB2         1:A:68:GLY:H         6         0.16           (1,1123)         1:A:445:ASRSHB2         1:A:68:GLY:H         6	(1,1452)	1:A:71:SER:HB2	1:A:88:VAL:HB	2	0.16
(1,1413) 1:A:67:GLN:HG2 1:A:68:GLY:H 4 0.16 (1,1413) 1:A:67:GLN:HG2 1:A:68:GLY:H 13 0.16 (1,137) 1:A:130:GLU:H 1:A:126:GLY:O 11 0.16 (1,137) 1:A:130:GLU:H 1:A:126:GLY:O 16 0.16 (1,1328) 1:A:60:GLU:HG3 1:A:61:GLY:H 10 0.16 (1,1328) 1:A:60:GLU:HG3 1:A:61:GLY:H 10 0.16 (1,133) 1:A:21:ALA:H 1:A:14:ARG:O 12 0.16 (1,1239) 1:A:52:ILE:HG21 1:A:68:GLY:H 6 0.16 (1,1239) 1:A:52:ILE:HG22 1:A:68:GLY:H 6 0.16 (1,1239) 1:A:52:ILE:HG22 1:A:68:GLY:H 6 0.16 (1,1174) 1:A:50-TRP:HE3 1:A:135:PHE:HB2 20 0.16 (1,1174) 1:A:50-TRP:HE3 1:A:135:PHE:HB2 20 0.16 (1,1175) 1:A:49:ARG:HB2 1:A:49:ARG:HD2 11 0.16 (1,1173) 1:A:48:ASN:HB2 1:A:45:ASN:HB2 1:A:45:ASN:HB3 1:A:45:ASN:HB3 1:A:45:ASN:HB3 1:A:45:ASN:HB3 1:A:45:ASN:HB3 1:A:45:ASN:HB3 1:A:45:ASN:HB3 1:A:45:AS:ASN:HB3 1:A:45:AS:ASN:HB3 1:A:45:AS:ASN:HB3 1:A:45:AS:ASP:HB 1:A:45:	(1,1426)	1:A:70:ALA:H	1:A:89:TYR:HD1	10	0.16
(1,1413)         1:A:67:GLN:HG2         1:A:68:GLY:H         13         0.16           (1,137)         1:A:130:GLU:H         1:A:126:GLY:O         11         0.16           (1,137)         1:A:130:GLU:H         1:A:126:GLY:O         16         0.16           (1,1328)         1:A:60:GLU:HG3         1:A:61:GLY:H         10         0.16           (1,139)         1:A:52:ILE:HG21         1:A:68:GLY:H         6         0.16           (1,1239)         1:A:52:ILE:HG22         1:A:68:GLY:H         6         0.16           (1,1239)         1:A:52:ILE:HG23         1:A:68:GLY:H         6         0.16           (1,1239)         1:A:52:ILE:HG23         1:A:68:GLY:H         6         0.16           (1,1239)         1:A:52:ILE:HG23         1:A:68:GLY:H         6         0.16           (1,1165)         1:A:49:ARG:HB2         1:A:49:ARG:HB2         10.16           (1,1165)         1:A:49:ARG:HB2         1:A:49:ARG:HB2         11         0.16           (1,1153)         1:A:46:ARG:HG2         1:A:47:ILE:H         4         0.16           (1,1160)         1:A:46:ARG:HG2         1:A:47:ILE:H         4         0.16           (1,1096)         1:A:45:ASN:HA         1:A:48:ASN:HD21         17	(1,1419)	1:A:69:ASN:HA	1:A:89:TYR:HD1	7	0.16
(1,137) 1:A:130:GLU:H 1:A:126:GLY:O 11 0.16 (1,137) 1:A:130:GLU:H 1:A:126:GLY:O 16 0.16 (1,138) 1:A:60:GLU:HG3 1:A:61:GLY:H 10 0.16 (1,13) 1:A:21:ALA:H 1:A:14:ARG:O 12 0.16 (1,1239) 1:A:52:ILE:HG21 1:A:68:GLY:H 6 0.16 (1,1239) 1:A:52:ILE:HG22 1:A:68:GLY:H 6 0.16 (1,1239) 1:A:52:ILE:HG23 1:A:68:GLY:H 6 0.16 (1,1239) 1:A:52:ILE:HG23 1:A:68:GLY:H 6 0.16 (1,1174) 1:A:50:TRP:HE3 1:A:135:PHE:HB2 20 0.16 (1,1174) 1:A:50:TRP:HE3 1:A:135:PHE:HB2 20 0.16 (1,1175) 1:A:49:ARG:HB2 1:A:49:ARG:HD2 11 0.16 (1,1153) 1:A:48:ASN:HB2 1:A:45:GLU:HG2 13 0.16 (1,1122) 1:A:46:ARG:HG2 1:A:47:ILE:H 4 0.16 (1,1098) 1:A:45:ASN:HA 1:A:48:ASN:HD21 17 0.16 (1,1098) 1:A:45:ASN:HA 1:A:48:ASN:HD21 17 0.16 (1,1098) 1:A:45:ASN:HA 1:A:48:ASN:HD21 17 0.16 (1,968) 1:A:37:VAL:HG21 1:A:109:LEU:O 7 0.16 (1,968) 1:A:37:VAL:HG22 1:A:108:THR:HA 20 0.15 (1,968) 1:A:37:VAL:HG21 1:A:108:THR:HA 20 0.15 (1,968) 1:A:37:VAL:HG23 1:A:108:THR:HA 20 0.15 (1,968) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HG3 1 0.15 (1,890) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HG3 1 0.15 (1,890) 1:A:34:VAL:HG12 1:A:108:THR:HA 20 0.15 (1,890) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HG3 1 0.15 (1,8	(1,1413)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:H	4	0.16
(1,137) 1:A:130:GLU:H 1:A:126:GLY:O 16 0.16 (1,1328) 1:A:60:GLU:HG3 1:A:61:GLY:H 10 0.16 (1,13) 1:A:21:ALA:H 1:A:14:ARG:O 12 0.16 (1,1239) 1:A:52:ILE:HG21 1:A:68:GLY:H 6 0.16 (1,1239) 1:A:52:ILE:HG22 1:A:68:GLY:H 6 0.16 (1,1239) 1:A:52:ILE:HG22 1:A:68:GLY:H 6 0.16 (1,1239) 1:A:52:ILE:HG23 1:A:68:GLY:H 6 0.16 (1,1239) 1:A:52:ILE:HG23 1:A:68:GLY:H 6 0.16 (1,1174) 1:A:50:TRP:HE3 1:A:135:PHE:HB2 20 0.16 (1,1165) 1:A:49:ARG:HB2 1:A:49:ARG:HD2 11 0.16 (1,1165) 1:A:49:ARG:HB2 1:A:49:ARG:HD2 11 0.16 (1,1163) 1:A:48:ASN:HB2 1:A:53:GLU:HG2 13 0.16 (1,1193) 1:A:46:ARG:HG2 1:A:47:ILE:H 4 0.16 (1,1098) 1:A:45:ASN:HA 1:A:48:ASN:HD21 17 0.16 (1,1098) 1:A:45:ASN:HA 1:A:48:ASN:HD21 17 0.16 (1,1096) 1:A:45:ASN:HA 1:A:48:ASN:HD21 17 0.16 (1,1096) 1:A:45:ASN:HA 1:A:48:ASN:HD21 17 0.16 (1,968) 1:A:37:VAL:HG21 1:A:108:THR:HA 20 0.15 (1,968) 1:A:37:VAL:HG22 1:A:108:THR:HA 20 0.15 (1,968) 1:A:37:VAL:HG22 1:A:108:THR:HA 20 0.15 (1,968) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HG3 1 0.15 (1,890) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HG3 1 0.15 (1,889) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HG 1 0 0.15 (1,888) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HG 1 0 0.15	(1,1413)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:H	13	0.16
(1,1328) 1:A:60:GLU:HG3 1:A:61:GLY:H 10 0.16 (1,13) 1:A:21:ALA:H 1:A:14:ARG:O 12 0.16 (1,1239) 1:A:52:ILE:HG21 1:A:68:GLY:H 6 0.16 (1,1239) 1:A:52:ILE:HG22 1:A:68:GLY:H 6 0.16 (1,1239) 1:A:52:ILE:HG23 1:A:68:GLY:H 6 0.16 (1,11239) 1:A:52:ILE:HG23 1:A:68:GLY:H 6 0.16 (1,1174) 1:A:50:TRP:HE3 1:A:135:PHE:HB2 20 0.16 (1,1165) 1:A:49:ARG:HB2 1:A:49:ARG:HD2 11 0.16 (1,1165) 1:A:49:ARG:HB2 1:A:49:ARG:HD2 11 0.16 (1,1153) 1:A:48:ASN:HB2 1:A:53:GLU:HG2 13 0.16 (1,1102) 1:A:46:ARG:HG2 1:A:47:ILE:H 4 0.16 (1,1098) 1:A:45:ASN:HA 1:A:48:ASN:HD21 17 0.16 (1,1098) 1:A:45:ASN:HA 1:A:48:ASN:HD21 17 0.16 (1,1096) 1:A:45:ASN:HA 1:A:48:ASN:HD21 17 0.16 (1,968) 1:A:37:VAL:HG21 1:A:109:ILEU:O 7 0.16 (1,968) 1:A:37:VAL:HG21 1:A:108:THR:HA 20 0.15 (1,968) 1:A:37:VAL:HG21 1:A:108:THR:HA 20 0.15 (1,980) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:108:GLU:HG3 1 0.15 (1,890) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HG3 1 0.15 (1,888) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HG3 1 0.15 (1,888) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HG3 1 0.15 (1,888) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HG4 1 0.15 (1,888) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HG4 1 0.15 (1,888) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HG4 1 0.15 (1,888) 1:A:34:VAL:HG12 1:A:103:GLU:HG4 1 0.15 (1,888) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HG4 1 0.15 (1,888) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HG4 1 0.15 (1,888) 1:A:34:VAL:HG13 1:A:103:GLU:HG4 1 0.15 (1,888) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:103:GLU:HG4 1 0.15 (1,888) 1:A:34:VAL:HG13 1:A:103:GLU:H 4 0.1	(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	11	0.16
(1,13)         1:A:21:ALA:H         1:A:14:ARG:O         12         0.16           (1,1239)         1:A:52:ILE:HG21         1:A:68:GLY:H         6         0.16           (1,1239)         1:A:52:ILE:HG22         1:A:68:GLY:H         6         0.16           (1,1239)         1:A:52:ILE:HG23         1:A:68:GLY:H         6         0.16           (1,1174)         1:A:50:TRP:HE3         1:A:135:PHE:HB2         20         0.16           (1,1174)         1:A:49:ARG:HB2         1:A:49:ARG:HD2         11         0.16           (1,1165)         1:A:49:ARG:HB2         1:A:49:ARG:HD2         11         0.16           (1,1153)         1:A:48:ASN:HB2         1:A:47:ILE:H         4         0.16           (1,1153)         1:A:48:ASN:HB2         1:A:47:ILE:H         4         0.16           (1,1098)         1:A:45:ASN:HA         1:A:48:ASN:HD21         17         0.16           (1,1096)         1:A:34:SASN:HA         1:A:48:ASN:HD21         17         0.16           (1,101)         1:A:102:SER:H         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,968)         1:A:37:VAL:HG22         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,968)         1:A:34:VAL:HG23         1:A:108:GLU:HG3	(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	16	0.16
(1,1239)         1:A:52:ILE:HG21         1:A:68:GLY:H         6         0.16           (1,1239)         1:A:52:ILE:HG22         1:A:68:GLY:H         6         0.16           (1,1239)         1:A:52:ILE:HG23         1:A:68:GLY:H         6         0.16           (1,1174)         1:A:50:TRP:HE3         1:A:135:PHE:HB2         20         0.16           (1,1174)         1:A:50:TRP:HE3         1:A:49:ARG:HD2         11         0.16           (1,1174)         1:A:49:ARG:HB2         1:A:49:ARG:HD2         11         0.16           (1,1153)         1:A:48:ASN:HB2         1:A:49:ARG:HD2         13         0.16           (1,1153)         1:A:48:ASN:HB2         1:A:49:ARG:HD2         13         0.16           (1,1152)         1:A:46:ARG:HG2         1:A:47:ILE:H         4         0.16           (1,102)         1:A:45:ASN:HA         1:A:48:ASN:HD21         17         0.16           (1,1096)         1:A:45:ASN:HA         1:A:48:ASN:HD21         17         0.16           (1,968)         1:A:37:VAL:HG21         1:A:109:LEU:O         7         0.16           (1,968)         1:A:37:VAL:HG23         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:H	(1,1328)	1:A:60:GLU:HG3	1:A:61:GLY:H	10	0.16
(1,1239)         1:A:52:ILE:HG22         1:A:68:GLY:H         6         0.16           (1,1239)         1:A:52:ILE:HG23         1:A:68:GLY:H         6         0.16           (1,1174)         1:A:50:TRP:HE3         1:A:68:GLY:H         6         0.16           (1,1165)         1:A:49:ARG:HB2         1:A:49:ARG:HD2         11         0.16           (1,1153)         1:A:48:ASN:HB2         1:A:53:GLU:HG2         13         0.16           (1,1192)         1:A:46:ARG:HG2         1:A:47:ILE:H         4         0.16           (1,1098)         1:A:45:ASN:HA         1:A:48:ASN:HD21         17         0.16           (1,1096)         1:A:45:ASN:HA         1:A:48:ASN:HD21         17         0.16           (1,1096)         1:A:45:ASN:HA         1:A:48:ASN:HD21         17         0.16           (1,1096)         1:A:37:VAL:HG21         1:A:109:LEU:O         7         0.16           (1,968)         1:A:37:VAL:HG21         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,968)         1:A:34:VAL:HG23         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:H	(1,13)	1:A:21:ALA:H	1:A:14:ARG:O	12	0.16
(1,1239)         1:A:52:ILE:HG23         1:A:68:GLY:H         6         0.16           (1,1174)         1:A:50:TRP:HE3         1:A:135:PHE:HB2         20         0.16           (1,1165)         1:A:49:ARG:HB2         1:A:49:ARG:HD2         11         0.16           (1,1153)         1:A:48:ASN:HB2         1:A:49:ARG:HD2         13         0.16           (1,1192)         1:A:46:ARG:HG2         1:A:47:ILE:H         4         0.16           (1,1098)         1:A:45:ASN:HA         1:A:48:ASN:HD21         17         0.16           (1,1096)         1:A:45:ASN:HA         1:A:48:ASN:HD21         17         0.16           (1,101)         1:A:102:SER:H         1:A:109:LEU:O         7         0.16           (1,968)         1:A:37:VAL:HG21         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,968)         1:A:37:VAL:HG22         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,968)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:G	(1,1239)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:68:GLY:H	6	0.16
(1,1174)         1:A:50:TRP:HE3         1:A:49:ARG:HB2         1:A:49:ARG:HB2         1:A:49:ARG:HD2         11         0.16           (1,1165)         1:A:49:ARG:HB2         1:A:49:ARG:HD2         11         0.16           (1,1153)         1:A:48:ASN:HB2         1:A:47:ILE:H         4         0.16           (1,1122)         1:A:46:ARG:HG2         1:A:47:ILE:H         4         0.16           (1,1098)         1:A:45:ASN:HA         1:A:48:ASN:HD21         17         0.16           (1,1096)         1:A:45:ASN:HA         1:A:48:ASN:HD21         17         0.16           (1,101)         1:A:102:SER:H         1:A:109:LEU:O         7         0.16           (1,968)         1:A:37:VAL:HG21         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,968)         1:A:37:VAL:HG22         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,968)         1:A:37:VAL:HG23         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,968)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,968)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890	(1,1239)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:68:GLY:H	6	0.16
(1,1165)         1:A:49:ARG:HB2         1:A:49:ARG:HD2         11         0.16           (1,1153)         1:A:48:ASN:HB2         1:A:53:GLU:HG2         13         0.16           (1,1122)         1:A:46:ARG:HG2         1:A:47:ILE:H         4         0.16           (1,1098)         1:A:45:ASN:HA         1:A:48:ASN:HD21         17         0.16           (1,1096)         1:A:45:ASN:HA         1:A:48:ASN:HD21         17         0.16           (1,101)         1:A:102:SER:H         1:A:109:LEU:O         7         0.16           (1,968)         1:A:37:VAL:HG21         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,968)         1:A:37:VAL:HG22         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,968)         1:A:34:VAL:HG23         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103	(1,1239)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:68:GLY:H	6	0.16
(1,1153)         1:A:48:ASN:HB2         1:A:53:GLU:HG2         13         0.16           (1,1122)         1:A:46:ARG:HG2         1:A:47:ILE:H         4         0.16           (1,1098)         1:A:45:ASN:HA         1:A:48:ASN:HD21         17         0.16           (1,1096)         1:A:45:ASN:HA         1:A:48:ASN:HD21         17         0.16           (1,101)         1:A:102:SER:H         1:A:109:LEU:O         7         0.16           (1,968)         1:A:37:VAL:HG21         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,968)         1:A:37:VAL:HG22         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,968)         1:A:37:VAL:HG23         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,968)         1:A:34:VAL:HG23         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:10	(1,1174)	1:A:50:TRP:HE3	1:A:135:PHE:HB2	20	0.16
(1,1122)         1:A:46:ARG:HG2         1:A:47:ILE:H         4         0.16           (1,1098)         1:A:45:ASN:HA         1:A:48:ASN:HD21         17         0.16           (1,1096)         1:A:45:ASN:HA         1:A:48:ASN:HD21         17         0.16           (1,101)         1:A:102:SER:H         1:A:109:LEU:O         7         0.16           (1,968)         1:A:37:VAL:HG21         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,968)         1:A:37:VAL:HG22         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,968)         1:A:37:VAL:HG23         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,968)         1:A:34:VAL:HG23         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:1	(1,1165)	1:A:49:ARG:HB2	1:A:49:ARG:HD2	11	0.16
(1,1098)         1:A:45:ASN:HA         1:A:48:ASN:HD21         17         0.16           (1,1096)         1:A:45:ASN:HA         1:A:48:ASN:HD21         17         0.16           (1,101)         1:A:102:SER:H         1:A:109:LEU:O         7         0.16           (1,968)         1:A:37:VAL:HG21         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,968)         1:A:37:VAL:HG22         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,968)         1:A:34:VAL:HG23         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG13         1	(1,1153)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HG2	13	0.16
(1,1096)         1:A:45:ASN:HA         1:A:48:ASN:HD21         17         0.16           (1,101)         1:A:102:SER:H         1:A:109:LEU:O         7         0.16           (1,968)         1:A:37:VAL:HG21         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,968)         1:A:37:VAL:HG22         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,968)         1:A:33:VAL:HG23         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG12	(1,1122)	1:A:46:ARG:HG2	1:A:47:ILE:H	4	0.16
(1,1096)         1:A:45:ASN:HA         1:A:48:ASN:HD21         17         0.16           (1,101)         1:A:102:SER:H         1:A:109:LEU:O         7         0.16           (1,968)         1:A:37:VAL:HG21         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,968)         1:A:37:VAL:HG22         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,968)         1:A:37:VAL:HG23         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,968)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG12	· · /	1:A:45:ASN:HA	1:A:48:ASN:HD21	17	0.16
(1,968)         1:A:37:VAL:HG21         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,968)         1:A:37:VAL:HG22         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,968)         1:A:37:VAL:HG23         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         15         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG14	(1,1096)	1:A:45:ASN:HA	1:A:48:ASN:HD21	17	0.16
(1,968)         1:A:37:VAL:HG22         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,968)         1:A:37:VAL:HG23         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HA         15         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HA         15         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13	(1,101)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:O	7	0.16
(1,968)         1:A:37:VAL:HG23         1:A:108:THR:HA         20         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HA         15         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HA         15         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HA         15         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13	(1,968)	1:A:37:VAL:HG21	1:A:108:THR:HA	20	0.15
(1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HA         15         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13	(1,968)	1:A:37:VAL:HG22	1:A:108:THR:HA	20	0.15
(1,890)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HA2         15         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HA         15         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HA         15         0.15           (1,888)         1:A:39:SER:H <td< td=""><td>(1,968)</td><td>1:A:37:VAL:HG23</td><td>1:A:108:THR:HA</td><td>20</td><td>0.15</td></td<>	(1,968)	1:A:37:VAL:HG23	1:A:108:THR:HA	20	0.15
(1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         1         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HA         15         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HA         15         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HA         15         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HA         15         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HA         15         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG14         1:A:103:GLU:HA         15         0.15           (1,888)         1:A:33:4VAL:HG14	(1,890)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HG3	1	0.15
(1,890)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HA         15         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HA         15         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HA         15         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HA         15         0.15           (1,888)         1:A:39:SER:H         1:A:39:GLU:HA         15         0.15           (1,888)         1:A:39:SER:H         1:A:36:GLU:HA         4         0.15           (1,848)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:36:GLU:H         4         0.15           (1,848)         1:A:31:ASP:HA         1:A:31:ASP:	(1,890)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HG3	1	0.15
(1,890)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,890)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG3         12         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HA         15         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HA         15         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HA         15         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HA         15         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HA         15         0.15           (1,888)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:87:TRP:O         11         0.15           (1,848)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:36:GLU:H         4         0.15           (1,848)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:36:GLU:H         4         0.15           (1,825)         1:A:31:ASP:HA         1:A:107:GL	(1,890)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HG3	1	0.15
(1,890)       1:A:34:VAL:HG13       1:A:103:GLU:HG3       12       0.15         (1,889)       1:A:34:VAL:HG11       1:A:103:GLU:HG2       10       0.15         (1,889)       1:A:34:VAL:HG12       1:A:103:GLU:HG2       10       0.15         (1,889)       1:A:34:VAL:HG13       1:A:103:GLU:HG2       10       0.15         (1,888)       1:A:34:VAL:HG11       1:A:103:GLU:HA       15       0.15         (1,888)       1:A:34:VAL:HG12       1:A:103:GLU:HA       15       0.15         (1,888)       1:A:34:VAL:HG13       1:A:103:GLU:HA       15       0.15         (1,888)       1:A:32:ALA:HB13       1:A:36:GLU:H       4       0.15         (1,848)       1:A:32:ALA:HB2       1:A:36:GLU:H       4       0.15         (1,848)       1:A:31:ASP:HA       1:A:107:GLY:H       4       0.15         (1,825)       1:A:31:ASP:HA       1:A:31:ASP:HB2       17       0.15	(1,890)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HG3	12	0.15
(1,889)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,889)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HG2         10         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:103:GLU:HA         15         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:103:GLU:HA         15         0.15           (1,888)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:103:GLU:HA         15         0.15           (1,888)         1:A:395:SER:H         1:A:87:TRP:O         11         0.15           (1,848)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:36:GLU:H         4         0.15           (1,848)         1:A:31:ASP:HA         1:A:36:GLU:H         4         0.15           (1,825)         1:A:31:ASP:HA         1:A:31:ASP:HB2         17         0.15           (1,822)         1:A:31:ASP:H         1:A:31:ASP:HB2 <td>(1,890)</td> <td>1:A:34:VAL:HG12</td> <td>1:A:103:GLU:HG3</td> <td>12</td> <td>0.15</td>	(1,890)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HG3	12	0.15
(1,889)       1:A:34:VAL:HG12       1:A:103:GLU:HG2       10       0.15         (1,889)       1:A:34:VAL:HG13       1:A:103:GLU:HG2       10       0.15         (1,888)       1:A:34:VAL:HG11       1:A:103:GLU:HA       15       0.15         (1,888)       1:A:34:VAL:HG12       1:A:103:GLU:HA       15       0.15         (1,888)       1:A:34:VAL:HG13       1:A:103:GLU:HA       15       0.15         (1,888)       1:A:34:VAL:HG13       1:A:103:GLU:HA       15       0.15         (1,888)       1:A:34:VAL:HG13       1:A:103:GLU:HA       15       0.15         (1,888)       1:A:32:SER:H       1:A:36:GLU:HA       15       0.15         (1,848)       1:A:32:ALA:HB1       1:A:36:GLU:H       4       0.15         (1,848)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:36:GLU:H       4       0.15         (1,825)       1:A:31:ASP:HA       1:A:107:GLY:H       14       0.15         (1,822)       1:A:31:ASP:H       1:A:31:ASP:HB2       17       0.15	(1,890)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HG3	12	0.15
(1,889)       1:A:34:VAL:HG13       1:A:103:GLU:HG2       10       0.15         (1,888)       1:A:34:VAL:HG11       1:A:103:GLU:HA       15       0.15         (1,888)       1:A:34:VAL:HG12       1:A:103:GLU:HA       15       0.15         (1,888)       1:A:34:VAL:HG13       1:A:103:GLU:HA       15       0.15         (1,87)       1:A:95:SER:H       1:A:87:TRP:O       11       0.15         (1,848)       1:A:32:ALA:HB1       1:A:36:GLU:H       4       0.15         (1,848)       1:A:32:ALA:HB2       1:A:36:GLU:H       4       0.15         (1,848)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:36:GLU:H       4       0.15         (1,825)       1:A:31:ASP:HA       1:A:107:GLY:H       14       0.15         (1,822)       1:A:31:ASP:H       1:A:31:ASP:HB2       17       0.15	(1,889)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HG2	10	0.15
(1,888)       1:A:34:VAL:HG11       1:A:103:GLU:HA       15       0.15         (1,888)       1:A:34:VAL:HG12       1:A:103:GLU:HA       15       0.15         (1,888)       1:A:34:VAL:HG13       1:A:103:GLU:HA       15       0.15         (1,888)       1:A:95:SER:H       1:A:87:TRP:O       11       0.15         (1,848)       1:A:32:ALA:HB1       1:A:36:GLU:H       4       0.15         (1,848)       1:A:32:ALA:HB2       1:A:36:GLU:H       4       0.15         (1,848)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:36:GLU:H       4       0.15         (1,848)       1:A:31:ASP:HA       1:A:107:GLY:H       14       0.15         (1,825)       1:A:31:ASP:HA       1:A:31:ASP:HB2       17       0.15	(1,889)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HG2	10	0.15
(1,888)       1:A:34:VAL:HG11       1:A:103:GLU:HA       15       0.15         (1,888)       1:A:34:VAL:HG12       1:A:103:GLU:HA       15       0.15         (1,888)       1:A:34:VAL:HG13       1:A:103:GLU:HA       15       0.15         (1,87)       1:A:95:SER:H       1:A:87:TRP:O       11       0.15         (1,848)       1:A:32:ALA:HB1       1:A:36:GLU:H       4       0.15         (1,848)       1:A:32:ALA:HB2       1:A:36:GLU:H       4       0.15         (1,848)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:36:GLU:H       4       0.15         (1,825)       1:A:31:ASP:HA       1:A:107:GLY:H       14       0.15         (1,822)       1:A:31:ASP:H       1:A:31:ASP:HB2       17       0.15		1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HG2	10	
(1,888)       1:A:34:VAL:HG12       1:A:103:GLU:HA       15       0.15         (1,888)       1:A:34:VAL:HG13       1:A:103:GLU:HA       15       0.15         (1,87)       1:A:95:SER:H       1:A:87:TRP:O       11       0.15         (1,848)       1:A:32:ALA:HB1       1:A:36:GLU:H       4       0.15         (1,848)       1:A:32:ALA:HB2       1:A:36:GLU:H       4       0.15         (1,848)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:36:GLU:H       4       0.15         (1,825)       1:A:31:ASP:HA       1:A:107:GLY:H       14       0.15         (1,822)       1:A:31:ASP:H       1:A:31:ASP:HB2       17       0.15	` ′	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HA	15	0.15
(1,888)       1:A:34:VAL:HG13       1:A:103:GLU:HA       15       0.15         (1,87)       1:A:95:SER:H       1:A:87:TRP:O       11       0.15         (1,848)       1:A:32:ALA:HB1       1:A:36:GLU:H       4       0.15         (1,848)       1:A:32:ALA:HB2       1:A:36:GLU:H       4       0.15         (1,848)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:36:GLU:H       4       0.15         (1,848)       1:A:31:ASP:HA       1:A:107:GLY:H       14       0.15         (1,825)       1:A:31:ASP:HA       1:A:31:ASP:HB2       17       0.15         (1,822)       1:A:31:ASP:H       1:A:31:ASP:HB2       17       0.15		1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HA	15	0.15
(1,87)       1:A:95:SER:H       1:A:87:TRP:O       11       0.15         (1,848)       1:A:32:ALA:HB1       1:A:36:GLU:H       4       0.15         (1,848)       1:A:32:ALA:HB2       1:A:36:GLU:H       4       0.15         (1,848)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:36:GLU:H       4       0.15         (1,848)       1:A:31:ASP:HA       1:A:107:GLY:H       14       0.15         (1,825)       1:A:31:ASP:HA       1:A:31:ASP:HB2       17       0.15		1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HA	15	0.15
(1,848)       1:A:32:ALA:HB1       1:A:36:GLU:H       4       0.15         (1,848)       1:A:32:ALA:HB2       1:A:36:GLU:H       4       0.15         (1,848)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:36:GLU:H       4       0.15         (1,848)       1:A:31:ASP:HA       1:A:107:GLY:H       14       0.15         (1,825)       1:A:31:ASP:HA       1:A:31:ASP:HB2       17       0.15         (1,822)       1:A:31:ASP:H       1:A:31:ASP:HB2       17       0.15		1:A:95:SER:H	1:A:87:TRP:O	11	0.15
(1,848)       1:A:32:ALA:HB2       1:A:36:GLU:H       4       0.15         (1,848)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:36:GLU:H       4       0.15         (1,825)       1:A:31:ASP:HA       1:A:107:GLY:H       14       0.15         (1,822)       1:A:31:ASP:H       1:A:31:ASP:HB2       17       0.15		1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:H	4	0.15
(1,848)       1:A:32:ALA:HB3       1:A:36:GLU:H       4       0.15         (1,825)       1:A:31:ASP:HA       1:A:107:GLY:H       14       0.15         (1,822)       1:A:31:ASP:H       1:A:31:ASP:HB2       17       0.15		1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:H	4	0.15
(1,825)       1:A:31:ASP:HA       1:A:107:GLY:H       14       0.15         (1,822)       1:A:31:ASP:H       1:A:31:ASP:HB2       17       0.15	_ `	1:A:32:ALA:HB3		4	0.15
(1,822) 1:A:31:ASP:H 1:A:31:ASP:HB2 17 0.15	_ ` ′	1:A:31:ASP:HA	1:A:107:GLY:H	14	0.15
	_ ` /	1:A:31:ASP:H	1:A:31:ASP:HB2	17	0.15
$\mid (1,t(\delta)) \mid 1$ :A:29:AKG:HG2 $\mid 1$ :A:29:AKG:HE $\mid 12 \mid 0.15$	(1,775)	1:A:29:ARG:HG2	1:A:29:ARG:HE	12	0.15



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,774)	1:A:29:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HB2	5	0.15
(1,773)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:30:TYR:H	4	0.15
(1,748)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HD11	16	0.15
(1,748)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HD12	16	0.15
(1,748)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HD13	16	0.15
(1,57)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:O	15	0.15
(1,459)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:19:GLY:H	7	0.15
(1,367)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HD2	12	0.15
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD11	5	0.15
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD12	5	0.15
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD13	5	0.15
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD11	5	0.15
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD12	5	0.15
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD13	5	0.15
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD11	5	0.15
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD12	5	0.15
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD13	5	0.15
(1,29)	1:A:29:ARG:H	1:A:6:ALA:O	10	0.15
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD11	2	0.15
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD12	2	0.15
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD13	2	0.15
(1,2712)	1:A:181:GLY:H	1:A:181:GLY:HA2	2	0.15
(1,2570)	1:A:168:GLN:HB2	1:A:168:GLN:HE22	20	0.15
(1,257)	1:A:9:ARG:HE	1:A:174:TRP:HD1	18	0.15
(1,2547)	1:A:166:ILE:HB	1:A:169:GLU:HG2	15	0.15
(1,2531)	1:A:165:ARG:HG2	1:A:166:ILE:H	3	0.15
(1,2515)	1:A:164:MET:HE1	1:A:168:GLN:HE22	7	0.15
(1,2515)	1:A:164:MET:HE2	1:A:168:GLN:HE22	7	0.15
(1,2515)	1:A:164:MET:HE3	1:A:168:GLN:HE22	7	0.15
(1,2461)	1:A:158:GLU:HB2	1:A:159:PRO:HD2	10	0.15
(1,2424)	1:A:152:ASP:H	1:A:153:ALA:H	19	0.15
(1,2414)	1:A:151:GLU:H	1:A:151:GLU:HG2	5	0.15
(1,2412)	1:A:150:PRO:HG2	1:A:151:GLU:H	16	0.15
(1,2365)	1:A:143:ASP:H	1:A:143:ASP:HB2	19	0.15
(1,2359)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:141:ARG:HD2	2	0.15
(1,2317)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD21	5	0.15
(1,2317)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD22	5	0.15
(1,2317)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD23	5	0.15
(1,2317)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD21	5	0.15
(1,2317)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD22	5	0.15
(1,2317)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD23	5	0.15
(1,2317)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD21	5	0.15



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2317)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD22	5	0.15
(1,2317)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD23	5	0.15
(1,2276)	1:A:135:PHE:HE1	1:A:138:MET:HE1	9	0.15
(1,2276)	1:A:135:PHE:HE1	1:A:138:MET:HE2	9	0.15
(1,2276)	1:A:135:PHE:HE1	1:A:138:MET:HE3	9	0.15
(1,2275)	1:A:135:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HD21	8	0.15
(1,2275)	1:A:135:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HD22	8	0.15
(1,2275)	1:A:135:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HD23	8	0.15
(1,2275)	1:A:135:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HD21	8	0.15
(1,2275)	1:A:135:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HD22	8	0.15
(1,2275)	1:A:135:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HD23	8	0.15
(1,2241)	1:A:132:ALA:HB1	1:A:135:PHE:HD1	8	0.15
(1,2241)	1:A:132:ALA:HB1	1:A:135:PHE:HD2	8	0.15
(1,2241)	1:A:132:ALA:HB2	1:A:135:PHE:HD1	8	0.15
(1,2241)	1:A:132:ALA:HB2	1:A:135:PHE:HD2	8	0.15
(1,2241)	1:A:132:ALA:HB3	1:A:135:PHE:HD1	8	0.15
(1,2241)	1:A:132:ALA:HB3	1:A:135:PHE:HD2	8	0.15
(1,2180)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:167:SER:HB2	16	0.15
(1,2180)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:167:SER:HB2	16	0.15
(1,2180)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:167:SER:HB2	16	0.15
(1,2126)	1:A:123:VAL:HG21	1:A:179:HIS:HD2	5	0.15
(1,2126)	1:A:123:VAL:HG22	1:A:179:HIS:HD2	5	0.15
(1,2126)	1:A:123:VAL:HG23	1:A:179:HIS:HD2	5	0.15
(1,2102)	1:A:123:VAL:HA	1:A:178:VAL:H	4	0.15
(1,2102)	1:A:123:VAL:HA	1:A:178:VAL:H	19	0.15
(1,2068)	1:A:121:MET:HG2	1:A:125:VAL:HG11	5	0.15
(1,2068)	1:A:121:MET:HG2	1:A:125:VAL:HG12	5	0.15
(1,2068)	1:A:121:MET:HG2	1:A:125:VAL:HG13	5	0.15
(1,200)	1:A:5:GLN:HG2	1:A:6:ALA:H	6	0.15
(1,181)	1:A:174:TRP:H	1:A:170:ARG:O	13	0.15
(1,179)	1:A:173:ALA:H	1:A:169:GLU:O	2	0.15
(1,1730)	1:A:95:SER:HB2	1:A:121:MET:HE1	1	0.15
(1,1730)	1:A:95:SER:HB2	1:A:121:MET:HE2	1	0.15
(1,1730)	1:A:95:SER:HB2	1:A:121:MET:HE3	1	0.15
(1,1730)	1:A:95:SER:HB2	1:A:121:MET:HE1	7	0.15
(1,1730)	1:A:95:SER:HB2	1:A:121:MET:HE2	7	0.15
(1,1730)	1:A:95:SER:HB2	1:A:121:MET:HE3	7	0.15
(1,173)	1:A:170:ARG:H	1:A:166:ILE:O	10	0.15
(1,1722)	1:A:94:ASP:H	1:A:94:ASP:HB2	1	0.15
(1,1722)	1:A:94:ASP:H	1:A:94:ASP:HB2	19	0.15
(1,1714)	1:A:92:LYS:HD2	1:A:93:PRO:HD2	11	0.15
(1,1690)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:90:GLU:HB2	19	0.15



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

Key	a from previous page <b>Atom-1</b>	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1689)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:121:MET:HE1	19	0.15
(1,1689)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:121:MET:HE2	19	0.15
(1,1689)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:121:MET:HE3	19	0.15
(1,1682)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:121:MET:HE1	6	0.15
(1,1682)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:121:MET:HE2	6	0.15
(1,1682)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:121:MET:HE3	6	0.15
(1,167)	1:A:167:SER:H	1:A:163:MET:O	20	0.15
(1,1517)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HD2	8	0.15
(1,1508)	1:A:76:ARG:H	1:A:76:ARG:HG2	2	0.15
(1,1507)	1:A:75:LEU:HD21	1:A:86:SER:HB2	4	0.15
(1,1507)	1:A:75:LEU:HD22	1:A:86:SER:HB2	4	0.15
(1,1507)	1:A:75:LEU:HD23	1:A:86:SER:HB2	4	0.15
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	12	0.15
(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	3	0.15
(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	17	0.15
(1,1336)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HD11	7	0.15
(1,1336)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HD12	7	0.15
(1,1336)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HD13	7	0.15
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD11	13	0.15
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD12	13	0.15
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD13	13	0.15
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD11	17	0.15
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD12	17	0.15
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD13	17	0.15
(1,131)	1:A:127:VAL:H	1:A:123:VAL:O	1	0.15
(1,1273)	1:A:55:LYS:HD2	1:A:56:GLY:H	16	0.15
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:56:GLY:H	16	0.15
(1,1241)	1:A:53:GLU:H	1:A:53:GLU:HB2	9	0.15
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:68:GLY:HA2	17	0.15
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:68:GLY:HA2	17	0.15
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:68:GLY:HA2	17	0.15
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:66:LEU:HA	4	0.15
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:66:LEU:HA	4	0.15
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:66:LEU:HA	4	0.15
(1,1202)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:129:TRP:HH2	12	0.15
(1,1155)	1:A:49:ARG:H	1:A:49:ARG:HD2	5	0.15
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD11	16	0.15
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD12	16	0.15
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD13	16	0.15
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD11	16	0.15
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD12	16	0.15
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD13	16	0.15



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD11	16	0.15
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD12	16	0.15
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD13	16	0.15
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD11	4	0.15
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD12	4	0.15
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD13	4	0.15
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD11	19	0.14
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD12	19	0.14
(1,938)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:140:ILE:HD13	19	0.14
(1,899)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:38:TRP:HD1	11	0.14
(1,899)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:38:TRP:HD1	11	0.14
(1,899)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:38:TRP:HD1	11	0.14
(1,897)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:37:VAL:H	9	0.14
(1,897)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:37:VAL:H	9	0.14
(1,897)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:37:VAL:H	9	0.14
(1,897)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:37:VAL:H	11	0.14
(1,897)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:37:VAL:H	11	0.14
(1,897)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:37:VAL:H	11	0.14
(1,897)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:37:VAL:H	12	0.14
(1,897)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:37:VAL:H	12	0.14
(1,897)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:37:VAL:H	12	0.14
(1,891)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HB2	6	0.14
(1,891)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HB2	6	0.14
(1,891)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HB2	6	0.14
(1,890)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HG3	11	0.14
(1,890)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HG3	11	0.14
(1,890)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HG3	11	0.14
(1,87)	1:A:95:SER:H	1:A:87:TRP:O	8	0.14
(1,860)	1:A:33:PRO:HB3	1:A:36:GLU:H	10	0.14
(1,848)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:H	5	0.14
(1,848)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:H	5	0.14
(1,848)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:H	5	0.14
(1,841)	1:A:32:ALA:HA	1:A:36:GLU:HB2	2	0.14
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	7	0.14
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD11	1	0.14
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD12	1	0.14
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD13	1	0.14
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD11	5	0.14
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD12	5	0.14
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD13	5	0.14
(1,749)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HD1	3	0.14
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD21	10	0.14



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD22	10	0.14
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD23	10	0.14
(1,689)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:28:GLN:HE22	20	0.14
(1,689)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:28:GLN:HE22	20	0.14
(1,689)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:28:GLN:HE22	20	0.14
(1,688)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:28:GLN:HE21	3	0.14
(1,688)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:28:GLN:HE21	3	0.14
(1,688)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:28:GLN:HE21	3	0.14
(1,603)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:114:HIS:HB2	4	0.14
(1,603)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:114:HIS:HB2	4	0.14
(1,603)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:114:HIS:HB2	4	0.14
(1,603)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:114:HIS:HB2	18	0.14
(1,603)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:114:HIS:HB2	18	0.14
(1,603)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:114:HIS:HB2	18	0.14
(1,57)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:O	6	0.14
(1,549)	1:A:23:SER:HB2	1:A:116:THR:H	20	0.14
(1,527)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:22:ARG:HD2	20	0.14
(1,493)	1:A:20:GLU:H	1:A:20:GLU:HB2	3	0.14
(1,461)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:21:ALA:H	12	0.14
(1,43)	1:A:42:THR:H	1:A:38:TRP:O	12	0.14
(1,427)	1:A:16:ILE:H	1:A:17:PRO:HD2	17	0.14
(1,333)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:181:GLY:HA2	11	0.14
(1,333)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:181:GLY:HA2	11	0.14
(1,333)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:181:GLY:HA2	11	0.14
(1,331)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:180:SER:H	4	0.14
(1,331)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:180:SER:H	4	0.14
(1,331)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:180:SER:H	4	0.14
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD11	18	0.14
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD12	18	0.14
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD13	18	0.14
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	12	0.14
(1,2654)	1:A:176:ALA:H	1:A:177:LEU:HB2	17	0.14
(1,2593)	1:A:172:GLU:H	1:A:172:GLU:HB2	16	0.14
(1,2562)	1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HB2	8	0.14
(1,2562)	1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HB2	13	0.14
(1,2502)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HD11	10	0.14
(1,2502)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HD12	10	0.14
(1,2502)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HD13	10	0.14
(1,2502)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HD11	10	0.14
(1,2502)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HD12	10	0.14
(1,2502)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HD13	10	0.14
(1,2502)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HD11	10	0.14



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2502)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HD12	10	0.14
(1,2502)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HD13	10	0.14
(1,2481)	1:A:162:GLU:H	1:A:162:GLU:HB2	20	0.14
(1,2445)	1:A:156:GLU:HA	1:A:156:GLU:HG2	9	0.14
(1,2439)	1:A:155:GLU:H	1:A:155:GLU:HB2	15	0.14
(1,2439)	1:A:155:GLU:H	1:A:155:GLU:HB2	18	0.14
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB1	1:A:155:GLU:H	9	0.14
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB2	1:A:155:GLU:H	9	0.14
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB3	1:A:155:GLU:H	9	0.14
(1,2428)	1:A:152:ASP:HA	1:A:154:ALA:HB1	1	0.14
(1,2428)	1:A:152:ASP:HA	1:A:154:ALA:HB2	1	0.14
(1,2428)	1:A:152:ASP:HA	1:A:154:ALA:HB3	1	0.14
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB1	5	0.14
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB2	5	0.14
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB3	5	0.14
(1,2387)	1:A:147:GLY:HA2	1:A:148:PRO:HD2	3	0.14
(1,2386)	1:A:147:GLY:H	1:A:148:PRO:HD2	16	0.14
(1,2371)	1:A:144:LEU:H	1:A:144:LEU:HB2	5	0.14
(1,2367)	1:A:143:ASP:H	1:A:144:LEU:HB2	3	0.14
(1,2365)	1:A:143:ASP:H	1:A:143:ASP:HB2	5	0.14
(1,2365)	1:A:143:ASP:H	1:A:143:ASP:HB2	9	0.14
(1,2327)	1:A:139:PHE:HA	1:A:144:LEU:HD11	18	0.14
(1,2327)	1:A:139:PHE:HA	1:A:144:LEU:HD12	18	0.14
(1,2327)	1:A:139:PHE:HA	1:A:144:LEU:HD13	18	0.14
(1,2325)	1:A:139:PHE:HA	1:A:144:LEU:HD11	18	0.14
(1,2325)	1:A:139:PHE:HA	1:A:144:LEU:HD12	18	0.14
(1,2325)	1:A:139:PHE:HA	1:A:144:LEU:HD13	18	0.14
(1,217)	1:A:7:THR:HG21	1:A:27:ARG:HB2	11	0.14
(1,217)	1:A:7:THR:HG22	1:A:27:ARG:HB2	11	0.14
(1,217)	1:A:7:THR:HG23	1:A:27:ARG:HB2	11	0.14
(1,2022)	1:A:118:SER:HB2	1:A:120:GLN:H	18	0.14
(1,193)	1:A:5:GLN:H	1:A:5:GLN:HB2	13	0.14
(1,193)	1:A:5:GLN:H	1:A:5:GLN:HB2	20	0.14
(1,191)	1:A:179:HIS:H	1:A:175:ALA:O	14	0.14
(1,1859)	1:A:104:GLU:HA	1:A:107:GLY:H	3	0.14
(1,1812)	1:A:101:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HA	10	0.14
(1,1812)	1:A:101:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HA	10	0.14
(1,1812)	1:A:101:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HA	10	0.14
(1,179)	1:A:173:ALA:H	1:A:169:GLU:O	10	0.14
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD21	19	0.14
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD22	19	0.14
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD23	19	0.14



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD21	19	0.14
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD22	19	0.14
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD23	19	0.14
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD21	19	0.14
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD22	19	0.14
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD23	19	0.14
(1,1728)	1:A:95:SER:HB2	1:A:114:HIS:HD2	8	0.14
(1,1722)	1:A:94:ASP:H	1:A:94:ASP:HB2	6	0.14
(1,1722)	1:A:94:ASP:H	1:A:94:ASP:HB2	13	0.14
(1,1693)	1:A:90:GLU:H	1:A:90:GLU:HB2	9	0.14
(1,1693)	1:A:90:GLU:H	1:A:90:GLU:HB2	18	0.14
(1,1674)	1:A:89:TYR:HA	1:A:90:GLU:HB2	19	0.14
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE1	3	0.14
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE2	3	0.14
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE3	3	0.14
(1,1649)	1:A:87:TRP:HE1	1:A:89:TYR:HE1	14	0.14
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	5	0.14
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	7	0.14
(1,1408)	1:A:67:GLN:HA	1:A:69:ASN:H	10	0.14
(1,1330)	1:A:60:GLU:HG2	1:A:77:CYS:H	11	0.14
(1,1319)	1:A:59:ARG:HG2	1:A:59:ARG:HE	4	0.14
(1,1314)	1:A:59:ARG:H	1:A:63:ASN:H	3	0.14
(1,1285)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HA	4	0.14
(1,1273)	1:A:55:LYS:HD2	1:A:56:GLY:H	9	0.14
(1,1241)	1:A:53:GLU:H	1:A:53:GLU:HB2	19	0.14
(1,1171)	1:A:50:TRP:HE1	1:A:136:LEU:HG	1	0.14
(1,1171)	1:A:50:TRP:HE1	1:A:136:LEU:HG	17	0.14
(1,1110)	1:A:46:ARG:HA	1:A:49:ARG:HG2	3	0.14
(1,1001)	1:A:38:TRP:HE1	1:A:79:PRO:HG2	13	0.14
(1,976)	1:A:38:TRP:H	1:A:108:THR:HG21	5	0.13
(1,976)	1:A:38:TRP:H	1:A:108:THR:HG22	5	0.13
(1,976)	1:A:38:TRP:H	1:A:108:THR:HG23	5	0.13
(1,976)	1:A:38:TRP:H	1:A:108:THR:HG21	8	0.13
(1,976)	1:A:38:TRP:H	1:A:108:THR:HG22	8	0.13
(1,976)	1:A:38:TRP:H	1:A:108:THR:HG23	8	0.13
(1,939)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:37:VAL:H	14	0.13
(1,904)	1:A:34:VAL:HG21	1:A:101:LEU:H	12	0.13
(1,904)	1:A:34:VAL:HG22	1:A:101:LEU:H	12	0.13
(1,904)	1:A:34:VAL:HG23	1:A:101:LEU:H	12	0.13
(1,897)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:37:VAL:H	6	0.13
(1,897)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:37:VAL:H	6	0.13
(1,897)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:37:VAL:H	6	0.13



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,895)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:HB2	13	0.13
(1,895)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:HB2	13	0.13
(1,895)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:HB2	13	0.13
(1,889)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HG2	7	0.13
(1,889)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HG2	7	0.13
(1,889)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HG2	7	0.13
(1,814)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD11	8	0.13
(1,814)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD12	8	0.13
(1,814)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:110:LEU:HD13	8	0.13
(1,771)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:104:GLU:HG2	4	0.13
(1,752)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD11	16	0.13
(1,752)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD12	16	0.13
(1,752)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD13	16	0.13
(1,746)	1:A:28:GLN:HG3	1:A:29:ARG:H	19	0.13
(1,688)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:28:GLN:HE21	9	0.13
(1,688)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:28:GLN:HE21	9	0.13
(1,688)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:28:GLN:HE21	9	0.13
(1,638)	1:A:25:ILE:HG21	1:A:111:GLU:HB2	4	0.13
(1,638)	1:A:25:ILE:HG22	1:A:111:GLU:HB2	4	0.13
(1,638)	1:A:25:ILE:HG23	1:A:111:GLU:HB2	4	0.13
(1,600)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:174:TRP:HZ3	3	0.13
(1,57)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:O	7	0.13
(1,555)	1:A:23:SER:HB3	1:A:116:THR:H	2	0.13
(1,549)	1:A:23:SER:HB2	1:A:116:THR:H	4	0.13
(1,549)	1:A:23:SER:HB2	1:A:116:THR:H	8	0.13
(1,527)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:22:ARG:HD2	4	0.13
(1,525)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:122:LEU:HD21	8	0.13
(1,525)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:122:LEU:HD22	8	0.13
(1,525)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:122:LEU:HD23	8	0.13
(1,427)	1:A:16:ILE:H	1:A:17:PRO:HD2	1	0.13
(1,427)	1:A:16:ILE:H	1:A:17:PRO:HD2	7	0.13
(1,427)	1:A:16:ILE:H	1:A:17:PRO:HD2	8	0.13
(1,293)	1:A:10:ALA:HB1	1:A:177:LEU:HD21	6	0.13
(1,293)	1:A:10:ALA:HB1	1:A:177:LEU:HD22	6	0.13
(1,293)	1:A:10:ALA:HB1	1:A:177:LEU:HD23	6	0.13
(1,293)	1:A:10:ALA:HB2	1:A:177:LEU:HD21	6	0.13
(1,293)	1:A:10:ALA:HB2	1:A:177:LEU:HD22	6	0.13
(1,293)	1:A:10:ALA:HB2	1:A:177:LEU:HD23	6	0.13
(1,293)	1:A:10:ALA:HB3	1:A:177:LEU:HD21	6	0.13
(1,293)	1:A:10:ALA:HB3	1:A:177:LEU:HD22	6	0.13
(1,293)	1:A:10:ALA:HB3	1:A:177:LEU:HD23	6	0.13
(1,29)	1:A:29:ARG:H	1:A:6:ALA:O	12	0.13



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD11	16	0.13
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD12	16	0.13
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD13	16	0.13
(1,271)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:174:TRP:HE1	3	0.13
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	13	0.13
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	16	0.13
(1,2664)	1:A:177:LEU:H	1:A:177:LEU:HB3	5	0.13
(1,2570)	1:A:168:GLN:HB2	1:A:168:GLN:HE22	5	0.13
(1,2562)	1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HB2	4	0.13
(1,2562)	1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HB2	17	0.13
(1,2557)	1:A:166:ILE:HG21	1:A:167:SER:HB2	8	0.13
(1,2557)	1:A:166:ILE:HG22	1:A:167:SER:HB2	8	0.13
(1,2557)	1:A:166:ILE:HG23	1:A:167:SER:HB2	8	0.13
(1,2550)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:170:ARG:HG2	12	0.13
(1,2550)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:170:ARG:HG2	12	0.13
(1,2550)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:170:ARG:HG2	12	0.13
(1,2518)	1:A:164:MET:HG2	1:A:165:ARG:H	18	0.13
(1,2510)	1:A:164:MET:HA	1:A:167:SER:HB2	5	0.13
(1,2507)	1:A:164:MET:H	1:A:164:MET:HG2	18	0.13
(1,2492)	1:A:163:MET:H	1:A:164:MET:HG2	18	0.13
(1,2492)	1:A:163:MET:H	1:A:164:MET:HG2	20	0.13
(1,2462)	1:A:158:GLU:HG2	1:A:159:PRO:HD2	15	0.13
(1,2454)	1:A:158:GLU:H	1:A:158:GLU:HB2	20	0.13
(1,2439)	1:A:155:GLU:H	1:A:155:GLU:HB2	16	0.13
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB1	1:A:156:GLU:H	1	0.13
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB2	1:A:156:GLU:H	1	0.13
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB3	1:A:156:GLU:H	1	0.13
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB1	1:A:156:GLU:H	4	0.13
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB2	1:A:156:GLU:H	4	0.13
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB3	1:A:156:GLU:H	4	0.13
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB1	1:A:155:GLU:H	10	0.13
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB2	1:A:155:GLU:H	10	0.13
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB3	1:A:155:GLU:H	10	0.13
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB1	1:A:154:ALA:H	3	0.13
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB2	1:A:154:ALA:H	3	0.13
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB3	1:A:154:ALA:H	3	0.13
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB1	1:A:154:ALA:H	10	0.13
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB2	1:A:154:ALA:H	10	0.13
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB3	1:A:154:ALA:H	10	0.13
(1,2430)	1:A:153:ALA:H	1:A:154:ALA:H	13	0.13
(1,243)	1:A:9:ARG:H	1:A:177:LEU:HD11	6	0.13
(1,243)	1:A:9:ARG:H	1:A:177:LEU:HD12	6	0.13



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,243)	1:A:9:ARG:H	1:A:177:LEU:HD13	6	0.13
(1,2423)	1:A:152:ASP:H	1:A:152:ASP:HB2	20	0.13
(1,2383)	1:A:145:PRO:HB2	1:A:146:GLY:H	11	0.13
(1,2365)	1:A:143:ASP:H	1:A:143:ASP:HB2	10	0.13
(1,2354)	1:A:141:ARG:H	1:A:142:GLY:H	1	0.13
(1,2316)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD11	3	0.13
(1,2316)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD12	3	0.13
(1,2316)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD13	3	0.13
(1,2316)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD11	3	0.13
(1,2316)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD12	3	0.13
(1,2316)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD13	3	0.13
(1,2316)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD11	3	0.13
(1,2316)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD12	3	0.13
(1,2316)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD13	3	0.13
(1,2314)	1:A:138:MET:HE1	1:A:143:ASP:HB3	9	0.13
(1,2314)	1:A:138:MET:HE2	1:A:143:ASP:HB3	9	0.13
(1,2314)	1:A:138:MET:HE3	1:A:143:ASP:HB3	9	0.13
(1,2313)	1:A:138:MET:HE1	1:A:143:ASP:HB2	14	0.13
(1,2313)	1:A:138:MET:HE2	1:A:143:ASP:HB2	14	0.13
(1,2313)	1:A:138:MET:HE3	1:A:143:ASP:HB2	14	0.13
(1,217)	1:A:7:THR:HG21	1:A:27:ARG:HB2	19	0.13
(1,217)	1:A:7:THR:HG22	1:A:27:ARG:HB2	19	0.13
(1,217)	1:A:7:THR:HG23	1:A:27:ARG:HB2	19	0.13
(1,2042)	1:A:119:GLU:HG2	1:A:178:VAL:HG11	16	0.13
(1,2042)	1:A:119:GLU:HG2	1:A:178:VAL:HG12	16	0.13
(1,2042)	1:A:119:GLU:HG2	1:A:178:VAL:HG13	16	0.13
(1,2041)	1:A:119:GLU:HG2	1:A:120:GLN:H	5	0.13
(1,2014)	1:A:118:SER:H	1:A:118:SER:HB2	8	0.13
(1,191)	1:A:179:HIS:H	1:A:175:ALA:O	15	0.13
(1,1908)	1:A:109:LEU:HG	1:A:111:GLU:HG2	15	0.13
(1,1859)	1:A:104:GLU:HA	1:A:107:GLY:H	8	0.13
(1,1848)	1:A:103:GLU:HG3	1:A:104:GLU:H	19	0.13
(1,1790)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:113:GLU:H	12	0.13
(1,1790)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:113:GLU:H	12	0.13
(1,1790)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:113:GLU:H	12	0.13
(1,179)	1:A:173:ALA:H	1:A:169:GLU:O	19	0.13
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HG	13	0.13
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HG	13	0.13
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HG	13	0.13
(1,1765)	1:A:98:GLU:HG2	1:A:99:LEU:H	5	0.13
(1,1737)	1:A:96:GLU:HG2	1:A:97:VAL:H	5	0.13
(1,173)	1:A:170:ARG:H	1:A:166:ILE:O	19	0.13



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1722)	1:A:94:ASP:H	1:A:94:ASP:HB2	2	0.13
(1,1682)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:121:MET:HE1	9	0.13
(1,1682)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:121:MET:HE2	9	0.13
(1,1682)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:121:MET:HE3	9	0.13
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE1	4	0.13
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE2	4	0.13
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE3	4	0.13
(1,1570)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:83:LEU:H	1	0.13
(1,1569)	1:A:82:ARG:HD2	1:A:100:ARG:HB2	9	0.13
(1,1532)	1:A:78:GLU:H	1:A:81:ARG:HB2	17	0.13
(1,153)	1:A:138:MET:H	1:A:134:ASP:O	9	0.13
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	19	0.13
(1,1443)	1:A:71:SER:H	1:A:87:TRP:HA	2	0.13
(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	13	0.13
(1,1350)	1:A:63:ASN:HB2	1:A:72:GLY:H	18	0.13
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD11	5	0.13
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD12	5	0.13
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD13	5	0.13
(1,1319)	1:A:59:ARG:HG2	1:A:59:ARG:HE	9	0.13
(1,1273)	1:A:55:LYS:HD2	1:A:56:GLY:H	18	0.13
(1,125)	1:A:124:GLU:H	1:A:120:GLN:O	1	0.13
(1,1241)	1:A:53:GLU:H	1:A:53:GLU:HB2	14	0.13
(1,1241)	1:A:53:GLU:H	1:A:53:GLU:HB2	17	0.13
(1,123)	1:A:123:VAL:H	1:A:119:GLU:O	10	0.13
(1,1225)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:69:ASN:HB2	9	0.13
(1,1225)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:69:ASN:HB2	9	0.13
(1,1225)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:69:ASN:HB2	9	0.13
(1,119)	1:A:116:THR:H	1:A:22:ARG:O	5	0.13
(1,119)	1:A:116:THR:H	1:A:22:ARG:O	19	0.13
(1,1171)	1:A:50:TRP:HE1	1:A:136:LEU:HG	4	0.13
(1,1171)	1:A:50:TRP:HE1	1:A:136:LEU:HG	8	0.13
(1,1165)	1:A:49:ARG:HB2	1:A:49:ARG:HD2	12	0.13
(1,1018)	1:A:38:TRP:HB2	1:A:39:SER:HB2	4	0.13
(1,929)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:39:SER:H	1	0.12
(1,904)	1:A:34:VAL:HG21	1:A:101:LEU:H	9	0.12
(1,904)	1:A:34:VAL:HG22	1:A:101:LEU:H	9	0.12
(1,904)	1:A:34:VAL:HG23	1:A:101:LEU:H	9	0.12
(1,891)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HB2	15	0.12
(1,891)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HB2	15	0.12
(1,891)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HB2	15	0.12
(1,890)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HG3	18	0.12
(1,890)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HG3	18	0.12



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,890)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HG3	18	0.12
(1,850)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:HG2	9	0.12
(1,850)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:HG2	9	0.12
(1,850)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:HG2	9	0.12
(1,849)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:HB2	6	0.12
(1,849)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:HB2	6	0.12
(1,849)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:HB2	6	0.12
(1,848)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:H	14	0.12
(1,848)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:H	14	0.12
(1,848)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:H	14	0.12
(1,825)	1:A:31:ASP:HA	1:A:107:GLY:H	3	0.12
(1,825)	1:A:31:ASP:HA	1:A:107:GLY:H	11	0.12
(1,746)	1:A:28:GLN:HG3	1:A:29:ARG:H	20	0.12
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD21	7	0.12
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD22	7	0.12
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD23	7	0.12
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD11	9	0.12
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD12	9	0.12
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD13	9	0.12
(1,726)	1:A:27:ARG:HG3	1:A:28:GLN:H	18	0.12
(1,689)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:28:GLN:HE22	7	0.12
(1,689)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:28:GLN:HE22	7	0.12
(1,689)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:28:GLN:HE22	7	0.12
(1,689)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:28:GLN:HE22	17	0.12
(1,689)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:28:GLN:HE22	17	0.12
(1,689)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:28:GLN:HE22	17	0.12
(1,530)	1:A:22:ARG:HD2	1:A:23:SER:H	2	0.12
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG21	5	0.12
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG22	5	0.12
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG23	5	0.12
(1,47)	1:A:47:ILE:H	1:A:43:ASP:O	9	0.12
(1,461)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:21:ALA:H	16	0.12
(1,461)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:21:ALA:H	18	0.12
(1,427)	1:A:16:ILE:H	1:A:17:PRO:HD2	9	0.12
(1,380)	1:A:13:ARG:HB2	1:A:13:ARG:HE	7	0.12
(1,37)	1:A:39:SER:H	1:A:35:ASP:O	3	0.12
(1,369)	1:A:13:ARG:H	1:A:23:SER:HG	2	0.12
(1,341)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:177:LEU:HD11	6	0.12
(1,341)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:177:LEU:HD12	6	0.12
(1,341)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:177:LEU:HD13	6	0.12
(1,341)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:177:LEU:HD11	6	0.12
(1,341)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:177:LEU:HD12	6	0.12



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,341)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:177:LEU:HD13	6	0.12
(1,341)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:177:LEU:HD11	6	0.12
(1,341)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:177:LEU:HD12	6	0.12
(1,341)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:177:LEU:HD13	6	0.12
(1,332)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:181:GLY:H	12	0.12
(1,332)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:181:GLY:H	12	0.12
(1,332)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:181:GLY:H	12	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD11	4	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD12	4	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD13	4	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD11	4	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD12	4	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD13	4	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD11	4	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD12	4	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD13	4	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD11	19	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD12	19	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD13	19	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD11	19	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD12	19	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD13	19	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD11	19	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD12	19	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD13	19	0.12
(1,297)	1:A:11:LEU:H	1:A:11:LEU:HG	2	0.12
(1,297)	1:A:11:LEU:H	1:A:11:LEU:HG	13	0.12
(1,297)	1:A:11:LEU:H	1:A:11:LEU:HG	17	0.12
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	6	0.12
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	15	0.12
(1,2664)	1:A:177:LEU:H	1:A:177:LEU:HB3	8	0.12
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD21	13	0.12
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD22	13	0.12
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD23	13	0.12
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD21	16	0.12
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD22	16	0.12
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD23	16	0.12
(1,257)	1:A:9:ARG:HE	1:A:174:TRP:HD1	10	0.12
(1,2547)	1:A:166:ILE:HB	1:A:169:GLU:HG2	14	0.12
(1,2526)	1:A:165:ARG:HA	1:A:168:GLN:HG2	5	0.12
(1,2507)	1:A:164:MET:H	1:A:164:MET:HG2	5	0.12
(1,2454)	1:A:158:GLU:H	1:A:158:GLU:HB2	18	0.12



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB1	1:A:154:ALA:H	20	0.12
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB2	1:A:154:ALA:H	20	0.12
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB3	1:A:154:ALA:H	20	0.12
(1,2387)	1:A:147:GLY:HA2	1:A:148:PRO:HD2	15	0.12
(1,2371)	1:A:144:LEU:H	1:A:144:LEU:HB2	15	0.12
(1,2363)	1:A:142:GLY:H	1:A:143:ASP:H	3	0.12
(1,2354)	1:A:141:ARG:H	1:A:142:GLY:H	10	0.12
(1,2330)	1:A:139:PHE:HB2	1:A:141:ARG:H	9	0.12
(1,2316)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD11	13	0.12
(1,2316)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD12	13	0.12
(1,2316)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD13	13	0.12
(1,2316)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD11	13	0.12
(1,2316)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD12	13	0.12
(1,2316)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD13	13	0.12
(1,2316)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD11	13	0.12
(1,2316)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD12	13	0.12
(1,2316)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD13	13	0.12
(1,2191)	1:A:127:VAL:HG21	1:A:174:TRP:H	8	0.12
(1,2191)	1:A:127:VAL:HG22	1:A:174:TRP:H	8	0.12
(1,2191)	1:A:127:VAL:HG23	1:A:174:TRP:H	8	0.12
(1,2102)	1:A:123:VAL:HA	1:A:178:VAL:H	2	0.12
(1,2050)	1:A:120:GLN:HB2	1:A:121:MET:H	4	0.12
(1,2041)	1:A:119:GLU:HG2	1:A:120:GLN:H	12	0.12
(1,2025)	1:A:119:GLU:H	1:A:119:GLU:HB2	15	0.12
(1,194)	1:A:5:GLN:H	1:A:5:GLN:HG2	12	0.12
(1,191)	1:A:179:HIS:H	1:A:175:ALA:O	9	0.12
(1,1862)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:108:THR:HA	17	0.12
(1,185)	1:A:176:ALA:H	1:A:172:GLU:O	1	0.12
(1,1848)	1:A:103:GLU:HG3	1:A:104:GLU:H	2	0.12
(1,1848)	1:A:103:GLU:HG3	1:A:104:GLU:H	8	0.12
(1,1838)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:HD21	6	0.12
(1,1838)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:HD22	6	0.12
(1,1838)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:HD23	6	0.12
(1,1835)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:H	3	0.12
(1,182)	1:A:174:TRP:N	1:A:170:ARG:O	13	0.12
(1,1790)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:113:GLU:H	15	0.12
(1,1790)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:113:GLU:H	15	0.12
(1,1790)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:113:GLU:H	15	0.12
(1,179)	1:A:173:ALA:H	1:A:169:GLU:O	4	0.12
(1,179)	1:A:173:ALA:H	1:A:169:GLU:O	16	0.12
(1,179)	1:A:173:ALA:H	1:A:169:GLU:O	17	0.12
(1,1731)	1:A:96:GLU:H	1:A:114:HIS:HD2	19	0.12



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1653)	1:A:87:TRP:HB2	1:A:95:SER:H	17	0.12
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE1	2	0.12
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE2	2	0.12
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE3	2	0.12
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE1	19	0.12
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE2	19	0.12
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE3	19	0.12
(1,165)	1:A:166:ILE:H	1:A:162:GLU:O	20	0.12
(1,163)	1:A:165:ARG:H	1:A:161:PRO:O	19	0.12
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	16	0.12
(1,1473)	1:A:74:ILE:HA	1:A:85:ILE:HG21	6	0.12
(1,1473)	1:A:74:ILE:HA	1:A:85:ILE:HG22	6	0.12
(1,1473)	1:A:74:ILE:HA	1:A:85:ILE:HG23	6	0.12
(1,1452)	1:A:71:SER:HB2	1:A:88:VAL:HB	7	0.12
(1,1452)	1:A:71:SER:HB2	1:A:88:VAL:HB	11	0.12
(1,1452)	1:A:71:SER:HB2	1:A:88:VAL:HB	15	0.12
(1,1443)	1:A:71:SER:H	1:A:87:TRP:HA	13	0.12
(1,1374)	1:A:65:ALA:HA	1:A:71:SER:HA	14	0.12
(1,1317)	1:A:59:ARG:H	1:A:74:ILE:HG21	15	0.12
(1,1317)	1:A:59:ARG:H	1:A:74:ILE:HG22	15	0.12
(1,1317)	1:A:59:ARG:H	1:A:74:ILE:HG23	15	0.12
(1,1286)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:64:PHE:HB2	8	0.12
(1,1241)	1:A:53:GLU:H	1:A:53:GLU:HB2	10	0.12
(1,1236)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:67:GLN:H	6	0.12
(1,1236)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:67:GLN:H	6	0.12
(1,1236)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:67:GLN:H	6	0.12
(1,123)	1:A:123:VAL:H	1:A:119:GLU:O	15	0.12
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:68:GLY:HA2	16	0.12
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:68:GLY:HA2	16	0.12
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:68:GLY:HA2	16	0.12
(1,1181)	1:A:50:TRP:HH2	1:A:133:LEU:HD21	11	0.12
(1,1181)	1:A:50:TRP:HH2	1:A:133:LEU:HD22	11	0.12
(1,1181)	1:A:50:TRP:HH2	1:A:133:LEU:HD23	11	0.12
(1,1167)	1:A:49:ARG:HG2	1:A:139:PHE:HZ	2	0.12
(1,1155)	1:A:49:ARG:H	1:A:49:ARG:HD2	2	0.12
(1,115)	1:A:114:HIS:H	1:A:24:ILE:O	6	0.12
(1,101)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:O	6	0.12
(1,101)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:O	17	0.12
(1,939)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:37:VAL:H	15	0.11
(1,919)	1:A:35:ASP:H	1:A:35:ASP:HB2	9	0.11
(1,9)	1:A:16:ILE:H	1:A:19:GLY:O	11	0.11
(1,897)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:37:VAL:H	3	0.11



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,897)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:37:VAL:H	3	0.11
(1,897)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:37:VAL:H	3	0.11
(1,897)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:37:VAL:H	14	0.11
(1,897)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:37:VAL:H	14	0.11
(1,897)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:37:VAL:H	14	0.11
(1,862)	1:A:33:PRO:HG3	1:A:36:GLU:H	3	0.11
(1,862)	1:A:33:PRO:HG3	1:A:36:GLU:H	7	0.11
(1,825)	1:A:31:ASP:HA	1:A:107:GLY:H	17	0.11
(1,822)	1:A:31:ASP:H	1:A:31:ASP:HB2	14	0.11
(1,816)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:133:LEU:HD11	3	0.11
(1,816)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:133:LEU:HD12	3	0.11
(1,816)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:133:LEU:HD13	3	0.11
(1,774)	1:A:29:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HB2	1	0.11
(1,767)	1:A:29:ARG:HE	1:A:104:GLU:HG2	15	0.11
(1,753)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD21	14	0.11
(1,753)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD22	14	0.11
(1,753)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD23	14	0.11
(1,745)	1:A:28:GLN:HG2	1:A:29:ARG:H	3	0.11
(1,742)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD21	14	0.11
(1,742)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD22	14	0.11
(1,742)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD23	14	0.11
(1,719)	1:A:27:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD21	19	0.11
(1,719)	1:A:27:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD22	19	0.11
(1,719)	1:A:27:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD23	19	0.11
(1,673)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:112:LEU:HD11	14	0.11
(1,673)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:112:LEU:HD12	14	0.11
(1,673)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:112:LEU:HD13	14	0.11
(1,673)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:112:LEU:HD11	14	0.11
(1,673)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:112:LEU:HD12	14	0.11
(1,673)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:112:LEU:HD13	14	0.11
(1,673)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:112:LEU:HD11	14	0.11
(1,673)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:112:LEU:HD12	14	0.11
(1,673)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:112:LEU:HD13	14	0.11
(1,63)	1:A:65:ALA:H	1:A:55:LYS:O	20	0.11
(1,57)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:O	16	0.11
(1,508)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:117:THR:HG21	4	0.11
(1,508)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:117:THR:HG22	4	0.11
(1,508)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:117:THR:HG23	4	0.11
(1,508)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:117:THR:HG21	4	0.11
(1,508)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:117:THR:HG22	4	0.11
(1,508)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:117:THR:HG23	4	0.11
(1,508)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:117:THR:HG21	4	0.11



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,508)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:117:THR:HG22	4	0.11
(1,508)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:117:THR:HG23	4	0.11
(1,494)	1:A:20:GLU:H	1:A:20:GLU:HG2	2	0.11
(1,494)	1:A:20:GLU:H	1:A:20:GLU:HG2	8	0.11
(1,47)	1:A:47:ILE:H	1:A:43:ASP:O	3	0.11
(1,47)	1:A:47:ILE:H	1:A:43:ASP:O	10	0.11
(1,459)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:19:GLY:H	14	0.11
(1,45)	1:A:43:ASP:H	1:A:39:SER:O	3	0.11
(1,431)	1:A:16:ILE:H	1:A:20:GLU:HB2	7	0.11
(1,43)	1:A:42:THR:H	1:A:38:TRP:O	7	0.11
(1,427)	1:A:16:ILE:H	1:A:17:PRO:HD2	3	0.11
(1,409)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:15:THR:H	18	0.11
(1,388)	1:A:14:ARG:H	1:A:22:ARG:HG2	14	0.11
(1,383)	1:A:13:ARG:HG2	1:A:14:ARG:HA	2	0.11
(1,37)	1:A:39:SER:H	1:A:35:ASP:O	19	0.11
(1,338)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:174:TRP:HH2	13	0.11
(1,338)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:174:TRP:HH2	13	0.11
(1,338)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:174:TRP:HH2	13	0.11
(1,335)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:22:ARG:HD2	12	0.11
(1,335)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:22:ARG:HD2	12	0.11
(1,335)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:22:ARG:HD2	12	0.11
(1,331)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:180:SER:H	19	0.11
(1,331)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:180:SER:H	19	0.11
(1,331)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:180:SER:H	19	0.11
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD11	1	0.11
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD12	1	0.11
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD13	1	0.11
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD11	1	0.11
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD12	1	0.11
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD13	1	0.11
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD11	1	0.11
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD12	1	0.11
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD13	1	0.11
(1,30)	1:A:29:ARG:N	1:A:6:ALA:O	20	0.11
(1,3)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:O	12	0.11
(1,29)	1:A:29:ARG:H	1:A:6:ALA:O	6	0.11
(1,29)	1:A:29:ARG:H	1:A:6:ALA:O	8	0.11
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD11	3	0.11
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD12	3	0.11
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD13	3	0.11
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD11	13	0.11
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD12	13	0.11
( ) /				orti



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD13	13	0.11
(1,2712)	1:A:181:GLY:H	1:A:181:GLY:HA2	1	0.11
(1,2712)	1:A:181:GLY:H	1:A:181:GLY:HA2	11	0.11
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	2	0.11
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	4	0.11
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	11	0.11
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	17	0.11
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	18	0.11
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	19	0.11
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	20	0.11
(1,2664)	1:A:177:LEU:H	1:A:177:LEU:HB3	16	0.11
(1,2664)	1:A:177:LEU:H	1:A:177:LEU:HB3	17	0.11
(1,2594)	1:A:172:GLU:H	1:A:172:GLU:HG2	7	0.11
(1,2560)	1:A:166:ILE:HG21	1:A:170:ARG:HD2	10	0.11
(1,2560)	1:A:166:ILE:HG22	1:A:170:ARG:HD2	10	0.11
(1,2560)	1:A:166:ILE:HG23	1:A:170:ARG:HD2	10	0.11
(1,2513)	1:A:164:MET:HE1	1:A:165:ARG:H	11	0.11
(1,2513)	1:A:164:MET:HE2	1:A:165:ARG:H	11	0.11
(1,2513)	1:A:164:MET:HE3	1:A:165:ARG:H	11	0.11
(1,2492)	1:A:163:MET:H	1:A:164:MET:HG2	8	0.11
(1,2471)	1:A:160:SER:HB2	1:A:162:GLU:H	19	0.11
(1,2454)	1:A:158:GLU:H	1:A:158:GLU:HB2	11	0.11
(1,2449)	1:A:157:PHE:H	1:A:157:PHE:HB2	2	0.11
(1,2449)	1:A:157:PHE:H	1:A:157:PHE:HB2	3	0.11
(1,2439)	1:A:155:GLU:H	1:A:155:GLU:HB2	20	0.11
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB1	1:A:155:GLU:H	14	0.11
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB2	1:A:155:GLU:H	14	0.11
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB3	1:A:155:GLU:H	14	0.11
(1,2413)	1:A:150:PRO:HG2	1:A:152:ASP:H	7	0.11
(1,2386)	1:A:147:GLY:H	1:A:148:PRO:HD2	8	0.11
(1,2363)	1:A:142:GLY:H	1:A:143:ASP:H	10	0.11
(1,2362)	1:A:141:ARG:HG2	1:A:142:GLY:H	8	0.11
(1,2354)	1:A:141:ARG:H	1:A:142:GLY:H	19	0.11
(1,2335)	1:A:139:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HG	11	0.11
(1,2335)	1:A:139:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HG	11	0.11
(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD11	1	0.11
(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD12	1	0.11
(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD13	1	0.11
(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD11	6	0.11
(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD12	6	0.11
(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD13	6	0.11
(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD11	18	0.11



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

(1,2320)	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2232) 1:A:131:MET:HG2 1:A:132:ALA:H 4 0.11 (1,2232) 1:A:131:MET:HG2 1:A:132:ALA:H 10 0.11 (1,217) 1:A:7:THR:HG21 1:A:27:ARG:HB2 17 0.11 (1,217) 1:A:7:THR:HG22 1:A:27:ARG:HB2 17 0.11 (1,217) 1:A:7:THR:HG22 1:A:27:ARG:HB2 17 0.11 (1,217) 1:A:7:THR:HG22 1:A:27:ARG:HB2 17 0.11 (1,2133) 1:A:124:GLU:HA 1:A:127:VAL:HB 4 0.11 (1,2050) 1:A:120:GLN:HB2 1:A:121:MET:H 16 0.11 (1,2050) 1:A:120:GLN:HB2 1:A:121:MET:H 18 0.11 (1,2050) 1:A:120:GLN:HB2 1:A:121:MET:H 18 0.11 (1,2030) 1:A:120:GLN:HB2 1:A:121:MET:H 18 0.11 (1,2030) 1:A:119:GLU:HA 1:A:122:LEU:HD11 15 0.11 (1,2030) 1:A:119:GLU:HA 1:A:122:LEU:HD12 15 0.11 (1,2030) 1:A:119:GLU:HA 1:A:122:LEU:HD12 15 0.11 (1,2030) 1:A:119:GLU:HA 1:A:122:LEU:HD13 15 0.11 (1,1956) 1:A:112:LEU:HD21 1:A:133:LEU:HD11 17 0.11 (1,1956) 1:A:112:LEU:HD21 1:A:133:LEU:HD12 17 0.11 (1,1956) 1:A:112:LEU:HD21 1:A:133:LEU:HD13 17 0.11 (1,1956) 1:A:112:LEU:HD22 1:A:133:LEU:HD13 17 0.11 (1,1956) 1:A:112:LEU:HD23 1:A:133:LEU:HD14 17 0.11 (1,1956) 1:A:112:LEU:HD24 1:A:14:HIS:HB3 11 0.11 (1,1956) 1:A:112:LEU:HD24 1:A:14:HIS:HB3 11 0.11 (1,1956) 1:A:112:LEU:HD24 1:A:14:HIS:HB3 11 0.11 (1,1950) 1:A:112:LEU:HD24 1:A:14:HIS:HB3 11 0.11 (1,1950) 1:A:112:LEU:HD24 1:A:14:HIS:HB3 14 0.11 (1,1950) 1:A:112:LEU:HD	(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD12	18	0.11
(1,2232)         1:A:131:MET:HG2         1:A:132:ALA:H         10         0.11           (1,217)         1:A:7:THR:HG21         1:A:27:ARG:HB2         17         0.11           (1,217)         1:A:7:THR:HG22         1:A:27:ARG:HB2         17         0.11           (1,217)         1:A:7:THR:HG23         1:A:27:ARG:HB2         17         0.11           (1,217)         1:A:7:THR:HG23         1:A:27:ARG:HB2         17         0.11           (1,2133)         1:A:120:GLN:HB2         1:A:121:MET:H         16         0.11           (1,2050)         1:A:120:GLN:HB2         1:A:121:MET:H         16         0.11           (1,2050)         1:A:120:GLN:HB2         1:A:121:MET:HB         8         0.11           (1,2031)         1:A:119:GLU:HA         1:A:120:GN:HB2         19         0.11           (1,2030)         1:A:119:GLU:HA         1:A:122:LEU:HD12         15         0.11           (1,2030)         1:A:119:GLU:HA         1:A:122:LEU:HD13         15         0.11           (1,2030)         1:A:118:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,206)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD21	(1,2320)	1:A:139:PHE:H	1:A:144:LEU:HD13	18	0.11
(1,217) 1:A:7:THR:HG21 1:A:27:ARG:HB2 17 0.11 (1,217) 1:A:7:THR:HG22 1:A:27:ARG:HB2 17 0.11 (1,217) 1:A:7:THR:HG23 1:A:27:ARG:HB2 17 0.11 (1,213) 1:A:124:GLU:HA 1:A:127:VAL:HB 4 0.11 (1,2050) 1:A:120:GLN:HB2 1:A:121:MET:H 16 0.11 (1,2050) 1:A:120:GLN:HB2 1:A:121:MET:H 18 0.11 (1,2030) 1:A:120:GLN:H 1:A:120:GLN:HB2 19 0.11 (1,2030) 1:A:119:GLU:HA 1:A:122:LEU:HD11 15 0.11 (1,2030) 1:A:119:GLU:HA 1:A:122:LEU:HD12 15 0.11 (1,2061) 1:A:119:GLU:HA 1:A:122:LEU:HD12 15 0.11 (1,2061) 1:A:112:LEU:HD21 1:A:133:LEU:HD11 17 0.11 (1,1956) 1:A:112:LEU:HD21 1:A:133:LEU:HD11 17 0.11 (1,1956) 1:A:112:LEU:HD21 1:A:133:LEU:HD11 17 0.11 (1,1956) 1:A:112:LEU:HD22 1:A:133:LEU:HD13 17 0.11 (1,1956) 1:A:112:LEU:HD23 1:A:133:LEU:HD14 17 0.11 (1,1956) 1:A:112:LEU:HD24 11-A:14:HIS:HB3 11 0.11 (1,1950) 1:A:112:LEU:HD24 11-A:14:HIS:HB3 11 0.11 (1,1950) 1:A:112:LEU:HD24 11-A:14:HIS:HB3 11 0.11 (1,1950) 1:A:112:LEU:HD24 11-A:14:HIS:HB3 14 0.11 (1,1950) 1:A:112:LEU:HD24 11-A:10:LEU:HD24 11-A:10:LEU:HD24 11-A:10:LEU:HD24 11-A:10:LEU:HD24 11-A:10:LEU:	(1,2232)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:H	4	0.11
(1,217)         1:A:7:THR:HG22         1:A:27:ARG:HB2         17         0.11           (1,217)         1:A:7:THR:HG23         1:A:27:ARG:HB2         17         0.11           (1,2133)         1:A:124:GLU:HA         1:A:127:VAL:HB         4         0.11           (1,2050)         1:A:120:GLN:HB2         1:A:121:MET:H         16         0.11           (1,2050)         1:A:120:GLN:HB2         1:A:121:MET:H         18         0.11           (1,2030)         1:A:119:GLU:HA         1:A:122:LEU:HD11         15         0.11           (1,2030)         1:A:119:GLU:HA         1:A:122:LEU:HD12         15         0.11           (1,2030)         1:A:119:GLU:HA         1:A:121:MET:HB2         11         0.11           (1,2030)         1:A:119:GLU:HA         1:A:121:MET:HB2         11         0.11           (1,2016)         1:A:119:GLU:HA         1:A:121:MET:HB2         17         0.11           (1,2066)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:121:MET:HB2         11         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23 <td>(1,2232)</td> <td>1:A:131:MET:HG2</td> <td>1:A:132:ALA:H</td> <td>10</td> <td>0.11</td>	(1,2232)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:H	10	0.11
(1,217)         1:A:7:THR:HG23         1:A:27:ARG:HB2         17         0.11           (1,2133)         1:A:124:GLU:HA         1:A:127:VAL:HB         4         0.11           (1,2050)         1:A:120:GLN:HB2         1:A:121:MET:H         16         0.11           (1,2050)         1:A:120:GLN:HB2         1:A:121:MET:H         18         0.11           (1,2030)         1:A:119:GLU:HA         1:A:120:GLN:HB2         19         0.11           (1,2030)         1:A:119:GLU:HA         1:A:122:LEU:HD11         15         0.11           (1,2030)         1:A:119:GLU:HA         1:A:122:LEU:HD12         15         0.11           (1,2030)         1:A:119:GLU:HA         1:A:122:LEU:HD13         15         0.11           (1,2030)         1:A:119:GLU:HD21         1:A:133:LEU:HD13         15         0.11           (1,2050)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:L	(1,217)	1:A:7:THR:HG21	1:A:27:ARG:HB2	17	0.11
(1,2133)         1:A:124:GLU:HA         1:A:121:MET:H         16         0.11           (1,2050)         1:A:120:GLN:HB2         1:A:121:MET:H         16         0.11           (1,2050)         1:A:120:GLN:HB2         1:A:121:MET:H         18         0.11           (1,2030)         1:A:119:GLU:HA         1:A:122:LEU:HD11         15         0.11           (1,2030)         1:A:119:GLU:HA         1:A:122:LEU:HD12         15         0.11           (1,2030)         1:A:119:GLU:HA         1:A:122:LEU:HD13         15         0.11           (1,2030)         1:A:118:SER:H         1:A:121:MET:HB2         11         0.11           (1,2016)         1:A:118:SER:H         1:A:121:MET:HB2         11         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:L	(1,217)	1:A:7:THR:HG22	1:A:27:ARG:HB2	17	0.11
(1,2050)         1:A:120:GLN:HB2         1:A:121:MET:H         16         0.11           (1,2050)         1:A:120:GLN:HB2         1:A:121:MET:H         18         0.11           (1,2043)         1:A:120:GLN:HB         1:A:120:GLN:HB2         19         0.11           (1,2030)         1:A:119:GLU:HA         1:A:122:LEU:HD11         15         0.11           (1,2030)         1:A:119:GLU:HA         1:A:122:LEU:HD13         15         0.11           (1,2030)         1:A:119:GLU:HA         1:A:122:LEU:HD13         15         0.11           (1,2030)         1:A:119:GLU:HA         1:A:122:LEU:HD13         15         0.11           (1,2016)         1:A:118:SER:H         1:A:121:MET:HB2         11         0.11           (1,2056)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:1	(1,217)	1:A:7:THR:HG23	1:A:27:ARG:HB2	17	0.11
(1,2050)         1:A:120:GLN:HB2         1:A:121:MET:H         18         0.11           (1,2043)         1:A:120:GLN:H         1:A:120:GLN:HB2         19         0.11           (1,2030)         1:A:119:GLU:HA         1:A:122:LEU:HD11         15         0.11           (1,2030)         1:A:119:GLU:HA         1:A:122:LEU:HD12         15         0.11           (1,2030)         1:A:119:GLU:HA         1:A:122:LEU:HD13         15         0.11           (1,2016)         1:A:119:GLU:HA         1:A:122:LEU:HD13         15         0.11           (1,2016)         1:A:119:GLU:HD21         1:A:121:MET:HB2         11         0.11           (1,2016)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956) <th< td=""><td>(1,2133)</td><td>1:A:124:GLU:HA</td><td>1:A:127:VAL:HB</td><td>4</td><td>0.11</td></th<>	(1,2133)	1:A:124:GLU:HA	1:A:127:VAL:HB	4	0.11
(1,2043)         1:A:120:GLN:H         1:A:120:GLN:HB2         19         0.11           (1,2030)         1:A:119:GLU:HA         1:A:122:LEU:HD11         15         0.11           (1,2030)         1:A:119:GLU:HA         1:A:122:LEU:HD12         15         0.11           (1,2030)         1:A:119:GLU:HA         1:A:122:LEU:HD13         15         0.11           (1,2016)         1:A:119:GLU:HA         1:A:121:MET:HB2         11         0.11           (1,2016)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1950)	(1,2050)	1:A:120:GLN:HB2	1:A:121:MET:H	16	0.11
(1,2030)         1:A:119:GLU:HA         1:A:122:LEU:HD11         15         0.11           (1,2030)         1:A:119:GLU:HA         1:A:122:LEU:HD12         15         0.11           (1,2030)         1:A:119:GLU:HA         1:A:122:LEU:HD13         15         0.11           (1,2016)         1:A:119:GLU:HA         1:A:121:MET:HB2         11         0.11           (1,2016)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         1         0.11           (1,1950)	(1,2050)	1:A:120:GLN:HB2	1:A:121:MET:H	18	0.11
(1,2030)         1:A:119:GLU:HA         1:A:122:LEU:HD12         15         0.11           (1,2030)         1:A:119:GLU:HA         1:A:122:LEU:HD13         15         0.11           (1,2016)         1:A:118:SER:H         1:A:121:MET:HB2         11         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         11         0.11           (1,1950)	(1,2043)	1:A:120:GLN:H	1:A:120:GLN:HB2	19	0.11
(1,2030)         1:A:119:GLU:HA         1:A:122:LEU:HD13         15         0.11           (1,2016)         1:A:118:SER:H         1:A:121:MET:HB2         11         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         11         0.11           (1,1950)	(1,2030)	1:A:119:GLU:HA	1:A:122:LEU:HD11	15	0.11
(1,2016)         1:A:118:SER:H         1:A:121:MET:HB2         11         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         11         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:114:HIS:HB3         11         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)	(1,2030)	1:A:119:GLU:HA	1:A:122:LEU:HD12	15	0.11
(1,1956)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         11         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:114:HIS:HB3         11         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950) <td>(1,2030)</td> <td>1:A:119:GLU:HA</td> <td>1:A:122:LEU:HD13</td> <td>15</td> <td>0.11</td>	(1,2030)	1:A:119:GLU:HA	1:A:122:LEU:HD13	15	0.11
(1,1956)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         11         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:114:HIS:HB3         11         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1944)	(1,2016)	1:A:118:SER:H	1:A:121:MET:HB2	11	0.11
(1,1956)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         11         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:114:HIS:HB3         11         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1940)	(1,1956)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:133:LEU:HD11	17	0.11
(1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:114:HIS:HB3         11         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:114:HIS:HB3         11         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1944)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1944)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:GLU:H         7         0.11           (1,1944)	(1,1956)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:133:LEU:HD12	17	0.11
(1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:114:HIS:HB3         11         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:114:HIS:HB3         11         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1944)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1944)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:GLU:H         7         0.11           (1,1944)	(1,1956)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:133:LEU:HD13	17	0.11
(1,1956)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:114:HIS:HB3         11         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:114:HIS:HB3         11         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1940)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:113:GLU:H         7         0.11           (1,1944)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:GLU:H         7         0.11           (1,1866)         1:A:104:GLU:HB2         1:A:109:LEU:HD21         7         0.11           (1,1866) <t< td=""><td>. ,</td><td>1:A:112:LEU:HD22</td><td>1:A:133:LEU:HD11</td><td>17</td><td>0.11</td></t<>	. ,	1:A:112:LEU:HD22	1:A:133:LEU:HD11	17	0.11
(1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD11         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:114:HIS:HB3         11         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:114:HIS:HB3         11         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1940)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:113:GLU:H         7         0.11           (1,1944)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:GLU:H         7         0.11           (1,1866)         1:A:104:GLU:HB2         1:A:109:LEU:HD21         7         0.11           (1,1866)         1:A:104:GLU:HB2         1:A:109:LEU:HD23         7         0.11           (1,1821)	(1,1956)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:133:LEU:HD12	17	0.11
(1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD12         17         0.11           (1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:114:HIS:HB3         11         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:114:HIS:HB3         11         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:113:GLU:H         7         0.11           (1,1944)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:GLU:H         7         0.11           (1,1944)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:GLU:H         7         0.11           (1,1944)         1:A:104:GLU:HB12         1:A:103:GLU:H         7         0.11           (1,1866)         1:A:104:GLU:HB2         1:A:109:LEU:HD21         7         0.11           (1,1866)         1:A:104:GLU:HB2         1:A:109:LEU:HD23         7         0.11           (1,1821)         1:A:101	(1,1956)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:133:LEU:HD13	17	0.11
(1,1956)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:133:LEU:HD13         17         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:114:HIS:HB3         11         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:114:HIS:HB3         11         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1944)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:GLU:H         7         0.11           (1,1944)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:GLU:H         7         0.11           (1,1944)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:13:GLU:H         7         0.11           (1,1944)         1:A:104:GLU:HB2         1:A:109:LEU:HD21         7         0.11           (1,1866)         1:A:104:GLU:HB2         1:A:109:LEU:HD22         7         0.11           (1,1866)         1:A:104:GLU:HB2         1:A:109:LEU:HD23         7         0.11           (1,1821)         1:A:101	(1,1956)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HD11	17	0.11
(1,1950)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:114:HIS:HB3         11         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:114:HIS:HB3         11         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:113:GLU:H         7         0.11           (1,1944)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:GLU:H         7         0.11           (1,1944)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:GLU:H         7         0.11           (1,1866)         1:A:104:GLU:HB2         1:A:109:LEU:HD21         7         0.11           (1,1866)         1:A:104:GLU:HB2         1:A:109:LEU:HD22         7         0.11           (1,1856)         1:A:104:GLU:HB2         1:A:109:LEU:HD23         7         0.11           (1,1821)         1:A:101:LEU:HD21         1:A:109:LEU:HD23         1:A:109:LEU:HG         19         0.11	(1,1956)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HD12	17	0.11
(1,1950)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:114:HIS:HB3         11         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         11         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1944)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:GLU:H         7         0.11           (1,1944)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:GLU:H         7         0.11           (1,1944)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:GLU:H         7         0.11           (1,1944)         1:A:104:GLU:HB2         1:A:109:LEU:HD21         7         0.11           (1,1866)         1:A:104:GLU:HB2         1:A:109:LEU:HD22         7         0.11           (1,1866)         1:A:104:GLU:HB2         1:A:109:LEU:HD23         7         0.11           (1,1821)         1:A:102:SER:HB2         1:A:109:LEU:HD23         7         0.11           (1,1821)         1:A:101:LEU:HD21         1:A:110:LEU:HG         19         0.11           (1,1821)         1:A:101:L	(1,1956)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HD13	17	0.11
(1,1950)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         11         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD21         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD22         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1950)         1:A:112:LEU:HD23         1:A:114:HIS:HB3         14         0.11           (1,1944)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:GLU:H         7         0.11           (1,1944)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:GLU:H         7         0.11           (1,1944)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:GLU:H         7         0.11           (1,1944)         1:A:104:GLU:HD13         1:A:109:LEU:HD21         7         0.11           (1,1866)         1:A:104:GLU:HB2         1:A:109:LEU:HD21         7         0.11           (1,1866)         1:A:104:GLU:HB2         1:A:109:LEU:HD23         7         0.11           (1,1835)         1:A:102:SER:HB2         1:A:109:LEU:HD23         7         0.11           (1,1821)         1:A:101:LEU:HD21         1:A:110:LEU:HG         19         0.11           (1,1821)         1:A:101:LEU:HD23         1:A:110:LEU:HG         19         0.11           (1,1821)         1:A:173:A	(1,1950)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:114:HIS:HB3	11	0.11
(1,1950)       1:A:112:LEU:HD21       1:A:114:HIS:HB3       14       0.11         (1,1950)       1:A:112:LEU:HD22       1:A:114:HIS:HB3       14       0.11         (1,1950)       1:A:112:LEU:HD23       1:A:114:HIS:HB3       14       0.11         (1,1944)       1:A:112:LEU:HD11       1:A:13:GLU:H       7       0.11         (1,1944)       1:A:112:LEU:HD12       1:A:13:GLU:H       7       0.11         (1,1944)       1:A:112:LEU:HD13       1:A:13:GLU:H       7       0.11         (1,1944)       1:A:112:LEU:HD13       1:A:103:GLU:H       7       0.11         (1,1866)       1:A:104:GLU:HB2       1:A:109:LEU:HD21       7       0.11         (1,1866)       1:A:104:GLU:HB2       1:A:109:LEU:HD22       7       0.11         (1,1866)       1:A:104:GLU:HB2       1:A:109:LEU:HD23       7       0.11         (1,1835)       1:A:102:SER:HB2       1:A:109:LEU:HD23       7       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD21       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD22       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,1821)       1:A:173:ALA:H       1:A:169:GLU:O       14       0.11	(1,1950)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:114:HIS:HB3	11	0.11
(1,1950)       1:A:112:LEU:HD22       1:A:114:HIS:HB3       14       0.11         (1,1950)       1:A:112:LEU:HD23       1:A:114:HIS:HB3       14       0.11         (1,1944)       1:A:112:LEU:HD11       1:A:113:GLU:H       7       0.11         (1,1944)       1:A:112:LEU:HD12       1:A:113:GLU:H       7       0.11         (1,1944)       1:A:112:LEU:HD13       1:A:113:GLU:H       7       0.11         (1,1944)       1:A:104:GLU:HB2       1:A:109:LEU:HD21       7       0.11         (1,1866)       1:A:104:GLU:HB2       1:A:109:LEU:HD22       7       0.11         (1,1866)       1:A:104:GLU:HB2       1:A:109:LEU:HD23       7       0.11         (1,1835)       1:A:102:SER:HB2       1:A:109:LEU:HD23       7       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD21       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD22       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,1821)       1:A:173:ALA:H       1:A:169:GLU:O       14       0.11	(1,1950)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:114:HIS:HB3	11	0.11
(1,1950)       1:A:112:LEU:HD23       1:A:114:HIS:HB3       14       0.11         (1,1944)       1:A:112:LEU:HD11       1:A:113:GLU:H       7       0.11         (1,1944)       1:A:112:LEU:HD12       1:A:113:GLU:H       7       0.11         (1,1944)       1:A:112:LEU:HD13       1:A:113:GLU:H       7       0.11         (1,1944)       1:A:102:LEU:HD13       1:A:109:LEU:HD21       7       0.11         (1,1866)       1:A:104:GLU:HB2       1:A:109:LEU:HD22       7       0.11         (1,1866)       1:A:104:GLU:HB2       1:A:109:LEU:HD23       7       0.11         (1,1835)       1:A:102:SER:HB2       1:A:109:LEU:HD23       7       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD21       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD22       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD23       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,179)       1:A:173:ALA:H       1:A:169:GLU:O       14       0.11	(1,1950)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:114:HIS:HB3	14	0.11
(1,1944)       1:A:112:LEU:HD11       1:A:113:GLU:H       7       0.11         (1,1944)       1:A:112:LEU:HD12       1:A:113:GLU:H       7       0.11         (1,1944)       1:A:112:LEU:HD13       1:A:113:GLU:H       7       0.11         (1,1866)       1:A:104:GLU:HB2       1:A:109:LEU:HD21       7       0.11         (1,1866)       1:A:104:GLU:HB2       1:A:109:LEU:HD22       7       0.11         (1,1866)       1:A:104:GLU:HB2       1:A:109:LEU:HD23       7       0.11         (1,1835)       1:A:102:SER:HB2       1:A:109:LEU:HD23       7       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD21       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD22       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD23       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,179)       1:A:173:ALA:H       1:A:169:GLU:O       14       0.11	(1,1950)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:114:HIS:HB3	14	0.11
(1,1944)       1:A:112:LEU:HD12       1:A:113:GLU:H       7       0.11         (1,1944)       1:A:112:LEU:HD13       1:A:113:GLU:H       7       0.11         (1,1866)       1:A:104:GLU:HB2       1:A:109:LEU:HD21       7       0.11         (1,1866)       1:A:104:GLU:HB2       1:A:109:LEU:HD22       7       0.11         (1,1866)       1:A:104:GLU:HB2       1:A:109:LEU:HD23       7       0.11         (1,1835)       1:A:102:SER:HB2       1:A:109:LEU:H       12       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD21       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD22       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD23       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,179)       1:A:173:ALA:H       1:A:169:GLU:O       14       0.11	(1,1950)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:114:HIS:HB3	14	0.11
(1,1944)       1:A:112:LEU:HD13       1:A:113:GLU:H       7       0.11         (1,1866)       1:A:104:GLU:HB2       1:A:109:LEU:HD21       7       0.11         (1,1866)       1:A:104:GLU:HB2       1:A:109:LEU:HD22       7       0.11         (1,1866)       1:A:104:GLU:HB2       1:A:109:LEU:HD23       7       0.11         (1,1835)       1:A:102:SER:HB2       1:A:109:LEU:H       12       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD21       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD22       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD23       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,179)       1:A:173:ALA:H       1:A:169:GLU:O       14       0.11	(1,1944)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:GLU:H	7	0.11
(1,1866)       1:A:104:GLU:HB2       1:A:109:LEU:HD21       7       0.11         (1,1866)       1:A:104:GLU:HB2       1:A:109:LEU:HD22       7       0.11         (1,1866)       1:A:104:GLU:HB2       1:A:109:LEU:HD23       7       0.11         (1,1835)       1:A:102:SER:HB2       1:A:109:LEU:H       12       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD21       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD22       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD23       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,179)       1:A:173:ALA:H       1:A:169:GLU:O       14       0.11	(1,1944)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:GLU:H	7	0.11
(1,1866)       1:A:104:GLU:HB2       1:A:109:LEU:HD22       7       0.11         (1,1866)       1:A:104:GLU:HB2       1:A:109:LEU:HD23       7       0.11         (1,1835)       1:A:102:SER:HB2       1:A:109:LEU:H       12       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD21       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD22       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD23       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,179)       1:A:173:ALA:H       1:A:169:GLU:O       14       0.11	(1,1944)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:GLU:H	7	0.11
(1,1866)       1:A:104:GLU:HB2       1:A:109:LEU:HD23       7       0.11         (1,1835)       1:A:102:SER:HB2       1:A:109:LEU:H       12       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD21       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD22       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD23       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,179)       1:A:173:ALA:H       1:A:169:GLU:O       14       0.11	(1,1866)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD21	7	0.11
(1,1866)       1:A:104:GLU:HB2       1:A:109:LEU:HD23       7       0.11         (1,1835)       1:A:102:SER:HB2       1:A:109:LEU:H       12       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD21       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD22       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD23       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,179)       1:A:173:ALA:H       1:A:169:GLU:O       14       0.11	· · /	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD22	7	0.11
(1,1835)       1:A:102:SER:HB2       1:A:109:LEU:H       12       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD21       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD22       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD23       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,179)       1:A:173:ALA:H       1:A:169:GLU:O       14       0.11		1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD23	7	0.11
(1,1821)       1:A:101:LEU:HD21       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD22       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD23       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,179)       1:A:173:ALA:H       1:A:169:GLU:O       14       0.11	· · /	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:H	12	0.11
(1,1821)       1:A:101:LEU:HD22       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,1821)       1:A:101:LEU:HD23       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,179)       1:A:173:ALA:H       1:A:169:GLU:O       14       0.11		1:A:101:LEU:HD21	1:A:110:LEU:HG	19	0.11
(1,1821)       1:A:101:LEU:HD23       1:A:110:LEU:HG       19       0.11         (1,179)       1:A:173:ALA:H       1:A:169:GLU:O       14       0.11	· · /	1:A:101:LEU:HD22	1:A:110:LEU:HG	19	0.11
(1,179) 1:A:173:ALA:H 1:A:169:GLU:O 14 0.11		1:A:101:LEU:HD23	1:A:110:LEU:HG	19	0.11
	/	1:A:173:ALA:H	1:A:169:GLU:O	14	0.11
	/	1:A:95:SER:HB2	1:A:114:HIS:HD2	5	0.11



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1705)	1:A:92:LYS:H	1:A:92:LYS:HB2	9	0.11
(1,1697)	1:A:90:GLU:HA	1:A:91:GLY:H	4	0.11
(1,1691)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HE2	7	0.11
(1,168)	1:A:167:SER:N	1:A:163:MET:O	20	0.11
(1,1621)	1:A:85:ILE:HD11	1:A:99:LEU:HB2	2	0.11
(1,1621)	1:A:85:ILE:HD12	1:A:99:LEU:HB2	2	0.11
(1,1621)	1:A:85:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HB2	2	0.11
(1,1573)	1:A:83:LEU:H	1:A:83:LEU:HD21	2	0.11
(1,1573)	1:A:83:LEU:H	1:A:83:LEU:HD22	2	0.11
(1,1573)	1:A:83:LEU:H	1:A:83:LEU:HD23	2	0.11
(1,1516)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HE	5	0.11
(1,1457)	1:A:73:ASP:H	1:A:74:ILE:HD11	14	0.11
(1,1457)	1:A:73:ASP:H	1:A:74:ILE:HD12	14	0.11
(1,1457)	1:A:73:ASP:H	1:A:74:ILE:HD13	14	0.11
(1,13)	1:A:21:ALA:H	1:A:14:ARG:O	1	0.11
(1,1275)	1:A:55:LYS:HG2	1:A:56:GLY:H	10	0.11
(1,1241)	1:A:53:GLU:H	1:A:53:GLU:HB2	11	0.11
(1,1241)	1:A:53:GLU:H	1:A:53:GLU:HB2	20	0.11
(1,123)	1:A:123:VAL:H	1:A:119:GLU:O	6	0.11
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:66:LEU:HA	10	0.11
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:66:LEU:HA	10	0.11
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:66:LEU:HA	10	0.11
(1,1205)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:52:ILE:H	7	0.11
(1,119)	1:A:116:THR:H	1:A:22:ARG:O	3	0.11
(1,119)	1:A:116:THR:H	1:A:22:ARG:O	6	0.11
(1,119)	1:A:116:THR:H	1:A:22:ARG:O	17	0.11
(1,1174)	1:A:50:TRP:HE3	1:A:135:PHE:HB2	8	0.11
(1,1170)	1:A:50:TRP:H	1:A:51:PHE:H	1	0.11
(1,1170)	1:A:50:TRP:H	1:A:51:PHE:H	5	0.11
(1,1069)	1:A:43:ASP:HB2	1:A:45:ASN:H	5	0.11
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD11	4	0.11
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD12	4	0.11
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD13	4	0.11
(1,1020)	1:A:39:SER:H	1:A:39:SER:HB2	12	0.11
(1,101)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:O	4	0.11
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD11	7	0.11
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD12	7	0.11
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD13	7	0.11
(1,988)	1:A:38:TRP:HA	1:A:99:LEU:HD11	8	0.1
(1,988)	1:A:38:TRP:HA	1:A:99:LEU:HD12	8	0.1
(1,988)	1:A:38:TRP:HA	1:A:99:LEU:HD13	8	0.1
(1,968)	1:A:37:VAL:HG21	1:A:108:THR:HA	9	0.1



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,968)	1:A:37:VAL:HG22	1:A:108:THR:HA	9	0.1
(1,968)	1:A:37:VAL:HG23	1:A:108:THR:HA	9	0.1
(1,897)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:37:VAL:H	16	0.1
(1,897)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:37:VAL:H	16	0.1
(1,897)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:37:VAL:H	16	0.1
(1,890)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HG3	16	0.1
(1,890)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HG3	16	0.1
(1,890)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HG3	16	0.1
(1,889)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HG2	19	0.1
(1,889)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HG2	19	0.1
(1,889)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HG2	19	0.1
(1,867)	1:A:34:VAL:H	1:A:103:GLU:HA	11	0.1
(1,850)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:HG2	19	0.1
(1,850)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:HG2	19	0.1
(1,850)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:HG2	19	0.1
(1,85)	1:A:87:TRP:H	1:A:95:SER:O	14	0.1
(1,849)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:HB2	4	0.1
(1,849)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:HB2	4	0.1
(1,849)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:HB2	4	0.1
(1,845)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:33:PRO:HD3	17	0.1
(1,845)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:33:PRO:HD3	17	0.1
(1,845)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:33:PRO:HD3	17	0.1
(1,776)	1:A:29:ARG:HG2	1:A:30:TYR:H	1	0.1
(1,769)	1:A:29:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD21	3	0.1
(1,769)	1:A:29:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD22	3	0.1
(1,769)	1:A:29:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD23	3	0.1
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD21	6	0.1
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD22	6	0.1
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD23	6	0.1
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD11	17	0.1
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD12	17	0.1
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD13	17	0.1
(1,635)	1:A:25:ILE:HG12	1:A:113:GLU:HA	14	0.1
(1,633)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:114:HIS:H	12	0.1
(1,633)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:114:HIS:H	12	0.1
(1,633)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:114:HIS:H	12	0.1
(1,63)	1:A:65:ALA:H	1:A:55:LYS:O	7	0.1
(1,63)	1:A:65:ALA:H	1:A:55:LYS:O	16	0.1
(1,57)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:O	18	0.1
(1,55)	1:A:58:LEU:H	1:A:63:ASN:O	14	0.1
(1,524)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:122:LEU:HD11	8	0.1
(1,524)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:122:LEU:HD12	8	0.1
		I .	Continue	



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,524)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:122:LEU:HD13	8	0.1
(1,520)	1:A:22:ARG:HA	1:A:22:ARG:HG2	6	0.1
(1,494)	1:A:20:GLU:H	1:A:20:GLU:HG2	4	0.1
(1,461)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:21:ALA:H	19	0.1
(1,40)	1:A:40:ALA:N	1:A:36:GLU:O	1	0.1
(1,399)	1:A:14:ARG:HE	1:A:15:THR:H	14	0.1
(1,383)	1:A:13:ARG:HG2	1:A:14:ARG:HA	15	0.1
(1,37)	1:A:39:SER:H	1:A:35:ASP:O	8	0.1
(1,333)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:181:GLY:HA2	16	0.1
(1,333)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:181:GLY:HA2	16	0.1
(1,333)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:181:GLY:HA2	16	0.1
(1,3)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:O	14	0.1
(1,297)	1:A:11:LEU:H	1:A:11:LEU:HG	5	0.1
(1,297)	1:A:11:LEU:H	1:A:11:LEU:HG	9	0.1
(1,297)	1:A:11:LEU:H	1:A:11:LEU:HG	15	0.1
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD11	7	0.1
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD12	7	0.1
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD13	7	0.1
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	8	0.1
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	10	0.1
(1,2664)	1:A:177:LEU:H	1:A:177:LEU:HB3	3	0.1
(1,2664)	1:A:177:LEU:H	1:A:177:LEU:HB3	19	0.1
(1,2659)	1:A:176:ALA:HA	1:A:179:HIS:HB3	14	0.1
(1,2570)	1:A:168:GLN:HB2	1:A:168:GLN:HE22	10	0.1
(1,2564)	1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HG2	7	0.1
(1,2518)	1:A:164:MET:HG2	1:A:165:ARG:H	12	0.1
(1,2518)	1:A:164:MET:HG2	1:A:165:ARG:H	14	0.1
(1,2470)	1:A:160:SER:HB2	1:A:161:PRO:HD2	9	0.1
(1,2465)	1:A:159:PRO:HG2	1:A:160:SER:H	18	0.1
(1,2449)	1:A:157:PHE:H	1:A:157:PHE:HB2	10	0.1
(1,2442)	1:A:155:GLU:HB2	1:A:156:GLU:H	16	0.1
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB1	1:A:156:GLU:H	10	0.1
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB2	1:A:156:GLU:H	10	0.1
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB3	1:A:156:GLU:H	10	0.1
(1,2430)	1:A:153:ALA:H	1:A:154:ALA:H	4	0.1
(1,2430)	1:A:153:ALA:H	1:A:154:ALA:H	8	0.1
(1,2392)	1:A:148:PRO:HD2	1:A:149:VAL:H	10	0.1
(1,2365)	1:A:143:ASP:H	1:A:143:ASP:HB2	3	0.1
(1,2232)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:H	17	0.1
(1,219)	1:A:7:THR:HG21	1:A:28:GLN:HG2	10	0.1
(1,219)	1:A:7:THR:HG22	1:A:28:GLN:HG2	10	0.1
(1,219)	1:A:7:THR:HG23	1:A:28:GLN:HG2	10	0.1



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,219)	1:A:7:THR:HG21	1:A:28:GLN:HG2	17	0.1
(1,219)	1:A:7:THR:HG22	1:A:28:GLN:HG2	17	0.1
(1,219)	1:A:7:THR:HG23	1:A:28:GLN:HG2	17	0.1
(1,2184)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:174:TRP:HD1	4	0.1
(1,2184)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:174:TRP:HD1	4	0.1
(1,2184)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:174:TRP:HD1	4	0.1
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:130:GLU:HB2	18	0.1
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:130:GLU:HB2	18	0.1
(1,2177)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:130:GLU:HB2	18	0.1
(1,2069)	1:A:121:MET:HG2	1:A:125:VAL:HG21	12	0.1
(1,2069)	1:A:121:MET:HG2	1:A:125:VAL:HG22	12	0.1
(1,2069)	1:A:121:MET:HG2	1:A:125:VAL:HG23	12	0.1
(1,2068)	1:A:121:MET:HG2	1:A:125:VAL:HG11	8	0.1
(1,2068)	1:A:121:MET:HG2	1:A:125:VAL:HG12	8	0.1
(1,2068)	1:A:121:MET:HG2	1:A:125:VAL:HG13	8	0.1
(1,2050)	1:A:120:GLN:HB2	1:A:121:MET:H	12	0.1
(1,2019)	1:A:118:SER:HA	1:A:121:MET:H	16	0.1
(1,1999)	1:A:116:THR:HG21	1:A:121:MET:HB2	18	0.1
(1,1999)	1:A:116:THR:HG22	1:A:121:MET:HB2	18	0.1
(1,1999)	1:A:116:THR:HG23	1:A:121:MET:HB2	18	0.1
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HD21	3	0.1
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HD22	3	0.1
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HD23	3	0.1
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HD21	3	0.1
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HD22	3	0.1
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HD23	3	0.1
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HD21	3	0.1
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HD22	3	0.1
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HD23	3	0.1
(1,194)	1:A:5:GLN:H	1:A:5:GLN:HG2	11	0.1
(1,1891)	1:A:108:THR:HG1	1:A:109:LEU:H	17	0.1
(1,1877)	1:A:106:ASP:HA	1:A:107:GLY:H	5	0.1
(1,185)	1:A:176:ALA:H	1:A:172:GLU:O	5	0.1
(1,1848)	1:A:103:GLU:HG3	1:A:104:GLU:H	6	0.1
(1,1837)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:HB3	6	0.1
(1,179)	1:A:173:ALA:H	1:A:169:GLU:O	1	0.1
(1,1786)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:111:GLU:H	4	0.1
(1,1786)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:111:GLU:H	4	0.1
(1,1786)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:111:GLU:H	4	0.1
(1,1765)	1:A:98:GLU:HG2	1:A:99:LEU:H	20	0.1
(1,174)	1:A:170:ARG:N	1:A:166:ILE:O	10	0.1
(1,1704)	1:A:91:GLY:H	1:A:92:LYS:H	9	0.1



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1698)	1:A:90:GLU:HA	1:A:92:LYS:H	5	0.1
(1,1653)	1:A:87:TRP:HB2	1:A:95:SER:H	1	0.1
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE1	1	0.1
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE2	1	0.1
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE3	1	0.1
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE1	7	0.1
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE2	7	0.1
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE3	7	0.1
(1,1575)	1:A:83:LEU:H	1:A:99:LEU:HB2	2	0.1
(1,1541)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:81:ARG:HG2	14	0.1
(1,1541)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:81:ARG:HG2	14	0.1
(1,147)	1:A:135:PHE:H	1:A:131:MET:O	20	0.1
(1,1443)	1:A:71:SER:H	1:A:87:TRP:HA	17	0.1
(1,1443)	1:A:71:SER:H	1:A:87:TRP:HA	19	0.1
(1,1420)	1:A:69:ASN:HA	1:A:89:TYR:HE1	9	0.1
(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	6	0.1
(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	9	0.1
(1,1342)	1:A:63:ASN:HA	1:A:73:ASP:HA	3	0.1
(1,1342)	1:A:63:ASN:HA	1:A:73:ASP:HA	17	0.1
(1,1258)	1:A:55:LYS:H	1:A:55:LYS:HG2	2	0.1
(1,1243)	1:A:53:GLU:H	1:A:54:PRO:HD2	12	0.1
(1,1241)	1:A:53:GLU:H	1:A:53:GLU:HB2	5	0.1
(1,1241)	1:A:53:GLU:H	1:A:53:GLU:HB2	13	0.1
(1,123)	1:A:123:VAL:H	1:A:119:GLU:O	1	0.1
(1,123)	1:A:123:VAL:H	1:A:119:GLU:O	9	0.1
(1,123)	1:A:123:VAL:H	1:A:119:GLU:O	11	0.1
(1,123)	1:A:123:VAL:H	1:A:119:GLU:O	14	0.1
(1,1226)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:69:ASN:HD21	14	0.1
(1,1226)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:69:ASN:HD21	14	0.1
(1,1226)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:69:ASN:HD21	14	0.1
(1,1221)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:69:ASN:H	4	0.1
(1,1221)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:69:ASN:H	4	0.1
(1,1221)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:69:ASN:H	4	0.1
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:66:LEU:HA	7	0.1
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:66:LEU:HA	7	0.1
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:66:LEU:HA	7	0.1
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE1	8	0.1
(1,1164)	1:A:49:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HE1	11	0.1
(1,1109)	1:A:46:ARG:HA	1:A:49:ARG:HD2	18	0.1
(1,1030)	1:A:40:ALA:H	1:A:46:ARG:HD2	20	0.1
(1,976)	1:A:38:TRP:H	1:A:108:THR:HG21	13	0.09
(1,976)	1:A:38:TRP:H	1:A:108:THR:HG22	13	0.09



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,976)	1:A:38:TRP:H	1:A:108:THR:HG23	13	0.09
(1,968)	1:A:37:VAL:HG21	1:A:108:THR:HA	6	0.09
(1,968)	1:A:37:VAL:HG22	1:A:108:THR:HA	6	0.09
(1,968)	1:A:37:VAL:HG23	1:A:108:THR:HA	6	0.09
(1,929)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:39:SER:H	3	0.09
(1,929)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:39:SER:H	13	0.09
(1,919)	1:A:35:ASP:H	1:A:35:ASP:HB2	15	0.09
(1,906)	1:A:34:VAL:HG21	1:A:102:SER:HA	11	0.09
(1,906)	1:A:34:VAL:HG22	1:A:102:SER:HA	11	0.09
(1,906)	1:A:34:VAL:HG23	1:A:102:SER:HA	11	0.09
(1,906)	1:A:34:VAL:HG21	1:A:102:SER:HA	16	0.09
(1,906)	1:A:34:VAL:HG22	1:A:102:SER:HA	16	0.09
(1,906)	1:A:34:VAL:HG23	1:A:102:SER:HA	16	0.09
(1,899)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:38:TRP:HD1	9	0.09
(1,899)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:38:TRP:HD1	9	0.09
(1,899)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:38:TRP:HD1	9	0.09
(1,896)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:36:GLU:H	16	0.09
(1,896)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:36:GLU:H	16	0.09
(1,896)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:36:GLU:H	16	0.09
(1,888)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HA	10	0.09
(1,888)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HA	10	0.09
(1,888)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HA	10	0.09
(1,867)	1:A:34:VAL:H	1:A:103:GLU:HA	14	0.09
(1,860)	1:A:33:PRO:HB3	1:A:36:GLU:H	8	0.09
(1,818)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:137:GLY:HA2	5	0.09
(1,773)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:30:TYR:H	11	0.09
(1,753)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD21	7	0.09
(1,753)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD22	7	0.09
(1,753)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD23	7	0.09
(1,75)	1:A:82:ARG:H	1:A:78:GLU:O	5	0.09
(1,75)	1:A:82:ARG:H	1:A:78:GLU:O	11	0.09
(1,742)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD21	7	0.09
(1,742)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD22	7	0.09
(1,742)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD23	7	0.09
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD21	12	0.09
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD22	12	0.09
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD23	12	0.09
(1,726)	1:A:27:ARG:HG3	1:A:28:GLN:H	1	0.09
(1,71)	1:A:76:ARG:H	1:A:84:THR:O	20	0.09
(1,63)	1:A:65:ALA:H	1:A:55:LYS:O	11	0.09
(1,57)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:O	3	0.09
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG21	18	0.09



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG22	18	0.09
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG23	18	0.09
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG21	19	0.09
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG22	19	0.09
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG23	19	0.09
(1,494)	1:A:20:GLU:H	1:A:20:GLU:HG2	10	0.09
(1,490)	1:A:19:GLY:HA2	1:A:117:THR:HG21	2	0.09
(1,490)	1:A:19:GLY:HA2	1:A:117:THR:HG22	2	0.09
(1,490)	1:A:19:GLY:HA2	1:A:117:THR:HG23	2	0.09
(1,459)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:19:GLY:H	20	0.09
(1,427)	1:A:16:ILE:H	1:A:17:PRO:HD2	16	0.09
(1,353)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:25:ILE:HA	12	0.09
(1,353)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:25:ILE:HA	12	0.09
(1,353)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:25:ILE:HA	12	0.09
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD11	15	0.09
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD12	15	0.09
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD13	15	0.09
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD11	15	0.09
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD12	15	0.09
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD13	15	0.09
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD11	15	0.09
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD12	15	0.09
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD13	15	0.09
(1,304)	1:A:11:LEU:H	1:A:25:ILE:HB	12	0.09
(1,3)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:O	20	0.09
(1,297)	1:A:11:LEU:H	1:A:11:LEU:HG	3	0.09
(1,29)	1:A:29:ARG:H	1:A:6:ALA:O	3	0.09
(1,2706)	1:A:179:HIS:H	1:A:180:SER:HB2	8	0.09
(1,2706)	1:A:179:HIS:H	1:A:180:SER:HB2	11	0.09
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	1	0.09
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	3	0.09
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	7	0.09
(1,2664)	1:A:177:LEU:H	1:A:177:LEU:HB3	4	0.09
(1,2664)	1:A:177:LEU:H	1:A:177:LEU:HB3	7	0.09
(1,2664)	1:A:177:LEU:H	1:A:177:LEU:HB3	15	0.09
(1,2644)	1:A:175:ALA:HA	1:A:178:VAL:HG21	16	0.09
(1,2644)	1:A:175:ALA:HA	1:A:178:VAL:HG22	16	0.09
(1,2644)	1:A:175:ALA:HA	1:A:178:VAL:HG23	16	0.09
(1,260)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:10:ALA:H	13	0.09
(1,2589)	1:A:170:ARG:HB2	1:A:174:TRP:HD1	4	0.09
(1,2570)	1:A:168:GLN:HB2	1:A:168:GLN:HE22	2	0.09
(1,2550)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:170:ARG:HG2	9	0.09



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2550)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:170:ARG:HG2	9	0.09
(1,2550)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:170:ARG:HG2	9	0.09
(1,2550)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:170:ARG:HG2	20	0.09
(1,2550)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:170:ARG:HG2	20	0.09
(1,2550)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:170:ARG:HG2	20	0.09
(1,2531)	1:A:165:ARG:HG2	1:A:166:ILE:H	7	0.09
(1,2530)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:168:GLN:HG2	2	0.09
(1,2524)	1:A:165:ARG:HA	1:A:168:GLN:HB2	17	0.09
(1,2471)	1:A:160:SER:HB2	1:A:162:GLU:H	15	0.09
(1,2469)	1:A:160:SER:HA	1:A:163:MET:H	19	0.09
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB1	1:A:155:GLU:H	7	0.09
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB2	1:A:155:GLU:H	7	0.09
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB3	1:A:155:GLU:H	7	0.09
(1,243)	1:A:9:ARG:H	1:A:177:LEU:HD11	9	0.09
(1,243)	1:A:9:ARG:H	1:A:177:LEU:HD12	9	0.09
(1,243)	1:A:9:ARG:H	1:A:177:LEU:HD13	9	0.09
(1,2424)	1:A:152:ASP:H	1:A:153:ALA:H	20	0.09
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:150:PRO:HD2	2	0.09
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:150:PRO:HD2	2	0.09
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:150:PRO:HD2	2	0.09
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:150:PRO:HD2	18	0.09
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:150:PRO:HD2	18	0.09
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:150:PRO:HD2	18	0.09
(1,2364)	1:A:142:GLY:H	1:A:144:LEU:HB2	19	0.09
(1,2363)	1:A:142:GLY:H	1:A:143:ASP:H	9	0.09
(1,2335)	1:A:139:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HG	17	0.09
(1,2335)	1:A:139:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HG	17	0.09
(1,2330)	1:A:139:PHE:HB2	1:A:141:ARG:H	17	0.09
(1,2316)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD11	4	0.09
(1,2316)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD12	4	0.09
(1,2316)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD13	4	0.09
(1,2316)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD11	4	0.09
(1,2316)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD12	4	0.09
(1,2316)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD13	4	0.09
(1,2316)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD11	4	0.09
(1,2316)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD12	4	0.09
(1,2316)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD13	4	0.09
(1,2313)	1:A:138:MET:HE1	1:A:143:ASP:HB2	1	0.09
(1,2313)	1:A:138:MET:HE2	1:A:143:ASP:HB2	1	0.09
(1,2313)	1:A:138:MET:HE3	1:A:143:ASP:HB2	1	0.09
(1,2229)	1:A:131:MET:HE1	1:A:132:ALA:H	18	0.09
(1,2229)	1:A:131:MET:HE2	1:A:132:ALA:H	18	0.09



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2229)	1:A:131:MET:HE3	1:A:132:ALA:H	18	0.09
(1,2221)	1:A:130:GLU:HG2	1:A:174:TRP:HZ2	18	0.09
(1,2102)	1:A:123:VAL:HA	1:A:178:VAL:H	13	0.09
(1,2060)	1:A:121:MET:HA	1:A:124:GLU:HG2	1	0.09
(1,2050)	1:A:120:GLN:HB2	1:A:121:MET:H	15	0.09
(1,1948)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:113:GLU:H	14	0.09
(1,1948)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:113:GLU:H	14	0.09
(1,1948)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:113:GLU:H	14	0.09
(1,192)	1:A:179:HIS:N	1:A:175:ALA:O	14	0.09
(1,191)	1:A:179:HIS:H	1:A:175:ALA:O	5	0.09
(1,191)	1:A:179:HIS:H	1:A:175:ALA:O	13	0.09
(1,191)	1:A:179:HIS:H	1:A:175:ALA:O	18	0.09
(1,19)	1:A:24:ILE:H	1:A:114:HIS:O	8	0.09
(1,1821)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:110:LEU:HG	10	0.09
(1,1821)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:110:LEU:HG	10	0.09
(1,1821)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:110:LEU:HG	10	0.09
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD21	5	0.09
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD22	5	0.09
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD23	5	0.09
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD21	5	0.09
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD22	5	0.09
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD23	5	0.09
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD21	5	0.09
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD22	5	0.09
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD23	5	0.09
(1,1719)	1:A:93:PRO:HA	1:A:94:ASP:H	9	0.09
(1,1714)	1:A:92:LYS:HD2	1:A:93:PRO:HD2	20	0.09
(1,1703)	1:A:90:GLU:HG2	1:A:91:GLY:H	13	0.09
(1,1693)	1:A:90:GLU:H	1:A:90:GLU:HB2	5	0.09
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE1	12	0.09
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE2	12	0.09
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE3	12	0.09
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE1	13	0.09
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE2	13	0.09
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE3	13	0.09
(1,1565)	1:A:82:ARG:HB3	1:A:99:LEU:H	5	0.09
(1,1543)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:82:ARG:H	19	0.09
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	4	0.09
(1,145)	1:A:134:ASP:H	1:A:130:GLU:O	11	0.09
(1,1408)	1:A:67:GLN:HA	1:A:69:ASN:H	16	0.09
(1,1392)	1:A:66:LEU:HA	1:A:67:GLN:H	10	0.09
(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	4	0.09



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	7	0.09
(1,131)	1:A:127:VAL:H	1:A:123:VAL:O	3	0.09
(1,126)	1:A:124:GLU:N	1:A:120:GLN:O	1	0.09
(1,124)	1:A:123:VAL:N	1:A:119:GLU:O	10	0.09
(1,123)	1:A:123:VAL:H	1:A:119:GLU:O	16	0.09
(1,119)	1:A:116:THR:H	1:A:22:ARG:O	1	0.09
(1,119)	1:A:116:THR:H	1:A:22:ARG:O	13	0.09
(1,1171)	1:A:50:TRP:HE1	1:A:136:LEU:HG	2	0.09
(1,1170)	1:A:50:TRP:H	1:A:51:PHE:H	4	0.09
(1,1150)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:H	11	0.09
(1,1122)	1:A:46:ARG:HG2	1:A:47:ILE:H	11	0.09
(1,1113)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HZ	4	0.09
(1,11)	1:A:19:GLY:H	1:A:16:ILE:O	16	0.09
(1,11)	1:A:19:GLY:H	1:A:16:ILE:O	18	0.09
(1,1069)	1:A:43:ASP:HB2	1:A:45:ASN:H	14	0.09
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD11	10	0.09
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD12	10	0.09
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD13	10	0.09
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD11	10	0.09
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD12	10	0.09
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD13	10	0.09
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD11	10	0.09
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD12	10	0.09
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD13	10	0.09
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD11	15	0.09
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD12	15	0.09
(1,1057)	1:A:41:CYS:HB2	1:A:99:LEU:HD13	15	0.09
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:140:ILE:HG21	8	0.09
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:140:ILE:HG22	8	0.09
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:140:ILE:HG23	8	0.09
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:140:ILE:HG21	8	0.09
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:140:ILE:HG22	8	0.09
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:140:ILE:HG23	8	0.09
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:140:ILE:HG21	8	0.09
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:140:ILE:HG22	8	0.09
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:140:ILE:HG23	8	0.09
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:140:ILE:HG21	13	0.09
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:140:ILE:HG22	13	0.09
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:140:ILE:HG23	13	0.09
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:140:ILE:HG21	13	0.09
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:140:ILE:HG22	13	0.09
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:140:ILE:HG23	13	0.09



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:140:ILE:HG21	13	0.09
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:140:ILE:HG22	13	0.09
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:140:ILE:HG23	13	0.09
(1,1020)	1:A:39:SER:H	1:A:39:SER:HB2	14	0.09
(1,904)	1:A:34:VAL:HG21	1:A:101:LEU:H	10	0.08
(1,904)	1:A:34:VAL:HG22	1:A:101:LEU:H	10	0.08
(1,904)	1:A:34:VAL:HG23	1:A:101:LEU:H	10	0.08
(1,9)	1:A:16:ILE:H	1:A:19:GLY:O	10	0.08
(1,896)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:36:GLU:H	6	0.08
(1,896)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:36:GLU:H	6	0.08
(1,896)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:36:GLU:H	6	0.08
(1,896)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:36:GLU:H	7	0.08
(1,896)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:36:GLU:H	7	0.08
(1,896)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:36:GLU:H	7	0.08
(1,888)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HA	19	0.08
(1,888)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HA	19	0.08
(1,888)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HA	19	0.08
(1,87)	1:A:95:SER:H	1:A:87:TRP:O	5	0.08
(1,87)	1:A:95:SER:H	1:A:87:TRP:O	17	0.08
(1,862)	1:A:33:PRO:HG3	1:A:36:GLU:H	4	0.08
(1,849)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:HB2	5	0.08
(1,849)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:HB2	5	0.08
(1,849)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:HB2	5	0.08
(1,848)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:H	9	0.08
(1,848)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:H	9	0.08
(1,848)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:H	9	0.08
(1,832)	1:A:32:ALA:H	1:A:107:GLY:HA2	19	0.08
(1,83)	1:A:86:SER:H	1:A:73:ASP:O	13	0.08
(1,825)	1:A:31:ASP:HA	1:A:107:GLY:H	15	0.08
(1,818)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:137:GLY:HA2	3	0.08
(1,818)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:137:GLY:HA2	17	0.08
(1,81)	1:A:85:ILE:H	1:A:97:VAL:O	16	0.08
(1,774)	1:A:29:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HB2	17	0.08
(1,756)	1:A:29:ARG:H	1:A:29:ARG:HD2	2	0.08
(1,753)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD21	19	0.08
(1,753)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD22	19	0.08
(1,753)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD23	19	0.08
(1,751)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HB2	13	0.08
(1,747)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HB2	5	0.08
(1,742)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD21	19	0.08
(1,742)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD22	19	0.08
(1,742)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD23	19	0.08



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD21	9	0.08
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD22	9	0.08
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD23	9	0.08
(1,719)	1:A:27:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD21	11	0.08
(1,719)	1:A:27:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD22	11	0.08
(1,719)	1:A:27:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD23	11	0.08
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD21	14	0.08
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD22	14	0.08
(1,690)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:112:LEU:HD23	14	0.08
(1,689)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:28:GLN:HE22	16	0.08
(1,689)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:28:GLN:HE22	16	0.08
(1,689)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:28:GLN:HE22	16	0.08
(1,633)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:114:HIS:H	11	0.08
(1,633)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:114:HIS:H	11	0.08
(1,633)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:114:HIS:H	11	0.08
(1,56)	1:A:58:LEU:N	1:A:63:ASN:O	14	0.08
(1,494)	1:A:20:GLU:H	1:A:20:GLU:HG2	5	0.08
(1,441)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:116:THR:H	11	0.08
(1,441)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:116:THR:H	11	0.08
(1,441)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:116:THR:H	11	0.08
(1,37)	1:A:39:SER:H	1:A:35:ASP:O	1	0.08
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD11	10	0.08
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD12	10	0.08
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD13	10	0.08
(1,346)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:22:ARG:HG2	12	0.08
(1,346)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:22:ARG:HG2	12	0.08
(1,346)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:22:ARG:HG2	12	0.08
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD11	2	0.08
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD12	2	0.08
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD13	2	0.08
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD11	2	0.08
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD12	2	0.08
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD13	2	0.08
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD11	2	0.08
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD12	2	0.08
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD13	2	0.08
(1,297)	1:A:11:LEU:H	1:A:11:LEU:HG	4	0.08
(1,297)	1:A:11:LEU:H	1:A:11:LEU:HG	10	0.08
(1,297)	1:A:11:LEU:H	1:A:11:LEU:HG	18	0.08
(1,297)	1:A:11:LEU:H	1:A:11:LEU:HG	19	0.08
(1,295)	1:A:10:ALA:HB1	1:A:25:ILE:HD11	9	0.08
(1,295)	1:A:10:ALA:HB1	1:A:25:ILE:HD12	9	0.08



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,295)	1:A:10:ALA:HB1	1:A:25:ILE:HD13	9	0.08
(1,295)	1:A:10:ALA:HB2	1:A:25:ILE:HD11	9	0.08
(1,295)	1:A:10:ALA:HB2	1:A:25:ILE:HD12	9	0.08
(1,295)	1:A:10:ALA:HB2	1:A:25:ILE:HD13	9	0.08
(1,295)	1:A:10:ALA:HB3	1:A:25:ILE:HD11	9	0.08
(1,295)	1:A:10:ALA:HB3	1:A:25:ILE:HD12	9	0.08
(1,295)	1:A:10:ALA:HB3	1:A:25:ILE:HD13	9	0.08
(1,29)	1:A:29:ARG:H	1:A:6:ALA:O	13	0.08
(1,2711)	1:A:180:SER:HA	1:A:181:GLY:H	13	0.08
(1,271)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:174:TRP:HE1	18	0.08
(1,2706)	1:A:179:HIS:H	1:A:180:SER:HB2	5	0.08
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	9	0.08
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	14	0.08
(1,2664)	1:A:177:LEU:H	1:A:177:LEU:HB3	1	0.08
(1,2664)	1:A:177:LEU:H	1:A:177:LEU:HB3	2	0.08
(1,2664)	1:A:177:LEU:H	1:A:177:LEU:HB3	11	0.08
(1,2664)	1:A:177:LEU:H	1:A:177:LEU:HB3	12	0.08
(1,2651)	1:A:175:ALA:HB1	1:A:179:HIS:HD2	16	0.08
(1,2651)	1:A:175:ALA:HB2	1:A:179:HIS:HD2	16	0.08
(1,2651)	1:A:175:ALA:HB3	1:A:179:HIS:HD2	16	0.08
(1,2571)	1:A:168:GLN:HB2	1:A:169:GLU:H	13	0.08
(1,2558)	1:A:166:ILE:HG21	1:A:169:GLU:HB2	11	0.08
(1,2558)	1:A:166:ILE:HG21	1:A:169:GLU:HB3	11	0.08
(1,2558)	1:A:166:ILE:HG22	1:A:169:GLU:HB2	11	0.08
(1,2558)	1:A:166:ILE:HG22	1:A:169:GLU:HB3	11	0.08
(1,2558)	1:A:166:ILE:HG23	1:A:169:GLU:HB2	11	0.08
(1,2558)	1:A:166:ILE:HG23	1:A:169:GLU:HB3	11	0.08
(1,2525)	1:A:165:ARG:HA	1:A:168:GLN:HE21	2	0.08
(1,2524)	1:A:165:ARG:HA	1:A:168:GLN:HB2	7	0.08
(1,2507)	1:A:164:MET:H	1:A:164:MET:HG2	8	0.08
(1,2503)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HG21	7	0.08
(1,2503)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HG22	7	0.08
(1,2503)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HG23	7	0.08
(1,2503)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HG21	7	0.08
(1,2503)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HG22	7	0.08
(1,2503)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HG23	7	0.08
(1,2503)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HG21	7	0.08
(1,2503)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HG22	7	0.08
(1,2503)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HG23	7	0.08
(1,2477)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HG2	14	0.08
(1,2476)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HE1	7	0.08
(1,2476)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HE2	7	0.08



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2476)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HE3	7	0.08
(1,2469)	1:A:160:SER:HA	1:A:163:MET:H	14	0.08
(1,2446)	1:A:156:GLU:HA	1:A:157:PHE:H	6	0.08
(1,2446)	1:A:156:GLU:HA	1:A:157:PHE:H	7	0.08
(1,2442)	1:A:155:GLU:HB2	1:A:156:GLU:H	10	0.08
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB1	1:A:154:ALA:H	12	0.08
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB2	1:A:154:ALA:H	12	0.08
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB3	1:A:154:ALA:H	12	0.08
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB1	1:A:154:ALA:H	13	0.08
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB2	1:A:154:ALA:H	13	0.08
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB3	1:A:154:ALA:H	13	0.08
(1,2415)	1:A:151:GLU:H	1:A:152:ASP:H	6	0.08
(1,2400)	1:A:149:VAL:HB	1:A:150:PRO:HD2	18	0.08
(1,2383)	1:A:145:PRO:HB2	1:A:146:GLY:H	7	0.08
(1,2380)	1:A:144:LEU:HB2	1:A:145:PRO:HD2	2	0.08
(1,2355)	1:A:141:ARG:H	1:A:143:ASP:H	14	0.08
(1,235)	1:A:8:GLU:HB3	1:A:27:ARG:H	10	0.08
(1,2313)	1:A:138:MET:HE1	1:A:143:ASP:HB2	18	0.08
(1,2313)	1:A:138:MET:HE2	1:A:143:ASP:HB2	18	0.08
(1,2313)	1:A:138:MET:HE3	1:A:143:ASP:HB2	18	0.08
(1,2284)	1:A:136:LEU:HB2	1:A:139:PHE:HB2	11	0.08
(1,2232)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:H	9	0.08
(1,2232)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:H	18	0.08
(1,2229)	1:A:131:MET:HE1	1:A:132:ALA:H	11	0.08
(1,2229)	1:A:131:MET:HE2	1:A:132:ALA:H	11	0.08
(1,2229)	1:A:131:MET:HE3	1:A:132:ALA:H	11	0.08
(1,2221)	1:A:130:GLU:HG2	1:A:174:TRP:HZ2	13	0.08
(1,219)	1:A:7:THR:HG21	1:A:28:GLN:HG2	2	0.08
(1,219)	1:A:7:THR:HG22	1:A:28:GLN:HG2	2	0.08
(1,219)	1:A:7:THR:HG23	1:A:28:GLN:HG2	2	0.08
(1,2184)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:174:TRP:HD1	2	0.08
(1,2184)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:174:TRP:HD1	2	0.08
(1,2184)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:174:TRP:HD1	2	0.08
(1,2184)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:174:TRP:HD1	19	0.08
(1,2184)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:174:TRP:HD1	19	0.08
(1,2184)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:174:TRP:HD1	19	0.08
(1,2050)	1:A:120:GLN:HB2	1:A:121:MET:H	9	0.08
(1,1999)	1:A:116:THR:HG21	1:A:121:MET:HB2	17	0.08
(1,1999)	1:A:116:THR:HG22	1:A:121:MET:HB2	17	0.08
(1,1999)	1:A:116:THR:HG23	1:A:121:MET:HB2	17	0.08
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:133:LEU:HD11	2	0.08
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:133:LEU:HD12	2	0.08



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

Key	a from previous page <b>Atom-1</b>	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:133:LEU:HD13	2	0.08
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD22		2	0.08
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:133:LEU:HD12	2	0.08
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:133:LEU:HD13	2	0.08
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HD11	2	0.08
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HD12	2	0.08
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HD13	2	0.08
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HD21	18	0.08
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HD22	18	0.08
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HD23	18	0.08
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HD21	18	0.08
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HD22	18	0.08
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HD23	18	0.08
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HD21	18	0.08
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HD22	18	0.08
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HD23	18	0.08
(1,1865)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD11	5	0.08
(1,1865)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD12	5	0.08
(1,1865)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD13	5	0.08
(1,1859)	1:A:104:GLU:HA	1:A:107:GLY:H	1	0.08
(1,1848)	1:A:103:GLU:HG3	1:A:104:GLU:H	15	0.08
(1,1847)	1:A:103:GLU:HG2	1:A:104:GLU:H	7	0.08
(1,1836)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:HB2	9	0.08
(1,1835)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:H	4	0.08
(1,1817)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:H	8	0.08
(1,1817)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:H	8	0.08
(1,1817)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:H	8	0.08
(1,179)	1:A:173:ALA:H	1:A:169:GLU:O	7	0.08
(1,179)	1:A:173:ALA:H	1:A:169:GLU:O	20	0.08
(1,175)	1:A:171:GLY:H	1:A:167:SER:O	16	0.08
(1,174)	1:A:170:ARG:N	1:A:166:ILE:O	19	0.08
(1,1689)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:121:MET:HE1	7	0.08
(1,1689)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:121:MET:HE2	7	0.08
(1,1689)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:121:MET:HE3	7	0.08
(1,1666)	1:A:88:VAL:HG11	1:A:94:ASP:HA	8	0.08
(1,1666)	1:A:88:VAL:HG12	1:A:94:ASP:HA	8	0.08
(1,1666)	1:A:88:VAL:HG13	1:A:94:ASP:HA	8	0.08
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE1	8	0.08
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE2	8	0.08
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE3	8	0.08
(1,163)	1:A:165:ARG:H	1:A:161:PRO:O	1	0.08
(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD11	11	0.08



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD12	11	0.08
(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD13	11	0.08
(1,151)	1:A:137:GLY:H	1:A:133:LEU:O	14	0.08
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	6	0.08
(1,1488)	1:A:75:LEU:HA	1:A:75:LEU:HD21	20	0.08
(1,1488)	1:A:75:LEU:HA	1:A:75:LEU:HD22	20	0.08
(1,1488)	1:A:75:LEU:HA	1:A:75:LEU:HD23	20	0.08
(1,145)	1:A:134:ASP:H	1:A:130:GLU:O	14	0.08
(1,1430)	1:A:70:ALA:HA	1:A:89:TYR:HE1	6	0.08
(1,141)	1:A:132:ALA:H	1:A:128:GLY:O	17	0.08
(1,1330)	1:A:60:GLU:HG2	1:A:77:CYS:H	4	0.08
(1,131)	1:A:127:VAL:H	1:A:123:VAL:O	5	0.08
(1,131)	1:A:127:VAL:H	1:A:123:VAL:O	17	0.08
(1,13)	1:A:21:ALA:H	1:A:14:ARG:O	18	0.08
(1,1299)	1:A:58:LEU:H	1:A:59:ARG:HG2	11	0.08
(1,1243)	1:A:53:GLU:H	1:A:54:PRO:HD2	16	0.08
(1,1239)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:68:GLY:H	12	0.08
(1,1239)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:68:GLY:H	12	0.08
(1,1239)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:68:GLY:H	12	0.08
(1,123)	1:A:123:VAL:H	1:A:119:GLU:O	3	0.08
(1,1227)	1:A:52:ILE:HG12	1:A:53:GLU:H	4	0.08
(1,119)	1:A:116:THR:H	1:A:22:ARG:O	2	0.08
(1,1188)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:136:LEU:HB2	12	0.08
(1,115)	1:A:114:HIS:H	1:A:24:ILE:O	13	0.08
(1,1127)	1:A:47:ILE:H	1:A:54:PRO:HD2	19	0.08
(1,1069)	1:A:43:ASP:HB2	1:A:45:ASN:H	3	0.08
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:140:ILE:HG21	11	0.08
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:140:ILE:HG22	11	0.08
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:140:ILE:HG23	11	0.08
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:140:ILE:HG21	11	0.08
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:140:ILE:HG22	11	0.08
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:140:ILE:HG23	11	0.08
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:140:ILE:HG21	11	0.08
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:140:ILE:HG22	11	0.08
(1,1043)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:140:ILE:HG23	11	0.08
(1,1039)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:139:PHE:HZ	12	0.08
(1,1039)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:139:PHE:HZ	12	0.08
(1,1039)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:139:PHE:HZ	12	0.08
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD11	6	0.08
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD12	6	0.08
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD13	6	0.08
(1,988)	1:A:38:TRP:HA	1:A:99:LEU:HD11	19	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,988)	1:A:38:TRP:HA	1:A:99:LEU:HD12	19	0.07
(1,988)	1:A:38:TRP:HA	1:A:99:LEU:HD13	19	0.07
(1,980)	1:A:38:TRP:H	1:A:39:SER:HB2	18	0.07
(1,911)	1:A:34:VAL:HG21	1:A:103:GLU:HG3	2	0.07
(1,911)	1:A:34:VAL:HG22	1:A:103:GLU:HG3	2	0.07
(1,911)	1:A:34:VAL:HG23	1:A:103:GLU:HG3	2	0.07
(1,9)	1:A:16:ILE:H	1:A:19:GLY:O	12	0.07
(1,896)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:36:GLU:H	17	0.07
(1,896)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:36:GLU:H	17	0.07
(1,896)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:36:GLU:H	17	0.07
(1,893)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:H	5	0.07
(1,893)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:H	5	0.07
(1,893)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:H	5	0.07
(1,889)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HG2	1	0.07
(1,889)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HG2	1	0.07
(1,889)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HG2	1	0.07
(1,867)	1:A:34:VAL:H	1:A:103:GLU:HA	12	0.07
(1,85)	1:A:87:TRP:H	1:A:95:SER:O	20	0.07
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG21	9	0.07
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG22	9	0.07
(1,810)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:37:VAL:HG23	9	0.07
(1,804)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:137:GLY:HA3	8	0.07
(1,776)	1:A:29:ARG:HG2	1:A:30:TYR:H	4	0.07
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD11	9	0.07
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD12	9	0.07
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD13	9	0.07
(1,769)	1:A:29:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD21	5	0.07
(1,769)	1:A:29:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD22	5	0.07
(1,769)	1:A:29:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD23	5	0.07
(1,756)	1:A:29:ARG:H	1:A:29:ARG:HD2	4	0.07
(1,753)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD21	16	0.07
(1,753)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD22	16	0.07
(1,753)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD23	16	0.07
(1,745)	1:A:28:GLN:HG2	1:A:29:ARG:H	9	0.07
(1,742)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD21	16	0.07
(1,742)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD22	16	0.07
(1,742)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD23	16	0.07
(1,684)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:133:LEU:HD21	12	0.07
(1,684)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:133:LEU:HD22	12	0.07
(1,684)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:133:LEU:HD23	12	0.07
(1,684)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:133:LEU:HD21	12	0.07
(1,684)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:133:LEU:HD22	12	0.07



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

(1,684)         1:A:26:ILE:HD12         1:A:133:LEU:HD23         12         0.07           (1,684)         1:A:26:ILE:HD13         1:A:133:LEU:HD21         12         0.07           (1,684)         1:A:26:ILE:HD13         1:A:133:LEU:HD22         12         0.07           (1,684)         1:A:72:GLY:H         1:A:64:PHE:O         11         0.07           (1,67)         1:A:72:GLY:H         1:A:64:PHE:O         11         0.07           (1,57)         1:A:61:GLY:H         1:A:74:ILE:O         14         0.07           (1,57)         1:A:61:GLY:H         1:A:63:ASN:O         11         0.07           (1,55)         1:A:58:LEU:H         1:A:63:ASN:O         11         0.07           (1,55)         1:A:58:LEU:H         1:A:63:ASN:O         18         0.07           (1,56)         1:A:22:ARG:H         1:A:22:ARG:HD2         16         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB1         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB1         1:A:117:THR:HG22         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB2         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB2         1:A:117:THR:HG22 <td< th=""><th><math>\mathbf{Key}</math></th><th>Atom-1</th><th>Atom-2</th><th>Model</th><th>Violation (Å)</th></td<>	$\mathbf{Key}$	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,684)         1:A:26:ILE:HD13         1:A:133:LEU:HD22         12         0.07           (1,684)         1:A:26:ILE:HD13         1:A:133:LEU:HD23         12         0.07           (1,67)         1:A:72:GLY:H         1:A:64:PHE:O         11         0.07           (1,57)         1:A:61:GLY:H         1:A:74:ILE:O         14         0.07           (1,57)         1:A:61:GLY:H         1:A:74:ILE:O         17         0.07           (1,55)         1:A:58:LEU:H         1:A:63:ASN:O         11         0.07           (1,55)         1:A:58:LEU:H         1:A:63:ASN:O         18         0.07           (1,55)         1:A:22:ARG:H         1:A:22:ARG:HD2         16         0.07           (1,556)         1:A:22:ARG:H         1:A:22:ARG:HD2         16         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB1         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB1         1:A:117:THR:HG22         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB2         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB2         1:A:117:THR:HG22         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG23 <t< td=""><td>(1,684)</td><td>1:A:26:ILE:HD12</td><td>1:A:133:LEU:HD23</td><td>12</td><td>0.07</td></t<>	(1,684)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:133:LEU:HD23	12	0.07
(1,684)         1:A:26:ILE:HD13         1:A:133:LEU:HD23         12         0.07           (1,67)         1:A:72:GLY:H         1:A:64:PHE:O         11         0.07           (1,57)         1:A:61:GLY:H         1:A:74:ILE:O         14         0.07           (1,57)         1:A:61:GLY:H         1:A:74:ILE:O         17         0.07           (1,55)         1:A:58:LEU:H         1:A:63:ASN:O         11         0.07           (1,55)         1:A:58:LEU:H         1:A:63:ASN:O         18         0.07           (1,55)         1:A:58:LEU:H         1:A:63:ASN:O         18         0.07           (1,55)         1:A:22:ARG:H         1:A:22:ARG:HD2         16         0.07           (1,56)         1:A:22:ARG:H         1:A:22:ARG:HD2         16         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB1         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB1         1:A:117:THR:HG23         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB2         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB2         1:A:117:THR:HG23         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG21         19	(1,684)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:133:LEU:HD21	12	0.07
(1,67)         1:A:72:GLY:H         1:A:64:PHE:O         11         0.07           (1,57)         1:A:61:GLY:H         1:A:74:ILE:O         14         0.07           (1,57)         1:A:61:GLY:H         1:A:74:ILE:O         17         0.07           (1,57)         1:A:61:GLY:H         1:A:74:ILE:O         17         0.07           (1,55)         1:A:58:LEU:H         1:A:63:ASN:O         18         0.07           (1,55)         1:A:58:LEU:H         1:A:63:ASN:O         18         0.07           (1,516)         1:A:22:ARG:H         1:A:22:ARG:HD2         16         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB1         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB1         1:A:117:THR:HG23         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB2         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB2         1:A:117:THR:HG22         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG23         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG23         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG23         19	(1,684)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:133:LEU:HD22	12	0.07
(1,57)         1:A:61:GLY:H         1:A:74:ILE:O         14         0.07           (1,57)         1:A:61:GLY:H         1:A:74:ILE:O         17         0.07           (1,55)         1:A:58:LEU:H         1:A:63:ASN:O         11         0.07           (1,55)         1:A:58:LEU:H         1:A:63:ASN:O         18         0.07           (1,55)         1:A:22:ARG:H         1:A:63:ASN:O         18         0.07           (1,516)         1:A:22:ARG:H         1:A:63:ASN:O         18         0.07           (1,516)         1:A:22:ARG:H         1:A:22:ARG:HD2         16         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB1         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB1         1:A:117:THR:HG23         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB2         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB2         1:A:117:THR:HG23         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG23         1	(1,684)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:133:LEU:HD23	12	0.07
(1,57)         1:A:61:GLY:H         1:A:74:ILE:O         17         0.07           (1,55)         1:A:58:LEU:H         1:A:63:ASN:O         11         0.07           (1,55)         1:A:58:LEU:H         1:A:63:ASN:O         18         0.07           (1,516)         1:A:22:ARG:H         1:A:22:ARG:HD2         16         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB1         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB1         1:A:117:THR:HG22         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB1         1:A:117:THR:HG23         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB2         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB2         1:A:117:THR:HG22         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG23         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG22         19         0.07           (1,496)         1:A:20:GLU:HG2         1:A:21:ALA:H <td>(1,67)</td> <td>1:A:72:GLY:H</td> <td>1:A:64:PHE:O</td> <td>11</td> <td>0.07</td>	(1,67)	1:A:72:GLY:H	1:A:64:PHE:O	11	0.07
(1,55)         1:A:58:LEU:H         1:A:63:ASN:O         11         0.07           (1,55)         1:A:58:LEU:H         1:A:63:ASN:O         18         0.07           (1,516)         1:A:22:ARG:H         1:A:22:ARG:HD2         16         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB1         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB1         1:A:117:THR:HG22         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB1         1:A:117:THR:HG23         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB2         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB2         1:A:117:THR:HG23         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB2         1:A:117:THR:HG23         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG22         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG22         19         0.07           (1,496)         1:A:20:GLU:HG2         1:A:21:ALA:H         3         0.07           (1,490)         1:A:19:GLY:HA2         1:A:117:THR:H	(1,57)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:O	14	0.07
(1,55)         1:A:58:LEU:H         1:A:63:ASN:O         18         0.07           (1,516)         1:A:22:ARG:H         1:A:22:ARG:HD2         16         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB1         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB1         1:A:117:THR:HG22         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB1         1:A:117:THR:HG23         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB2         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB2         1:A:117:THR:HG22         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG23         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG22         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG22         19         0.07           (1,496)         1:A:20:GLU:HG2         1:A:117:THR:HG23         19         0.07           (1,490)         1:A:19:GLY:HA2         1	(1,57)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:O	17	0.07
(1,516)         1:A:22:ARG:H         1:A:22:ARG:HD2         16         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB1         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB1         1:A:117:THR:HG22         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB1         1:A:117:THR:HG23         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB2         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB2         1:A:117:THR:HG22         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB2         1:A:117:THR:HG23         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG23         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG23         19         0.07           (1,496)         1:A:20:GLU:HG2         1:A:21:ALA:H         3         0.07           (1,490)         1:A:19:GLY:HA2         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,490)         1:A:19:GLY:HA2 <td< td=""><td>(1,55)</td><td>1:A:58:LEU:H</td><td>1:A:63:ASN:O</td><td>11</td><td>0.07</td></td<>	(1,55)	1:A:58:LEU:H	1:A:63:ASN:O	11	0.07
(1,508)         1:A:21:ALA:HB1         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB1         1:A:117:THR:HG22         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB1         1:A:117:THR:HG23         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB2         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB2         1:A:117:THR:HG22         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB2         1:A:117:THR:HG23         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG22         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG22         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG23         19         0.07           (1,496)         1:A:20:GLU:HG2         1:A:21:ALA:H         3         0.07           (1,490)         1:A:19:GLY:HA2         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,490)         1:A:19:GLY:HA2         1:A:117:THR:HG22         19         0.07           (1,43)         1:A:42:THR:H <t< td=""><td>(1,55)</td><td>1:A:58:LEU:H</td><td>1:A:63:ASN:O</td><td>18</td><td>0.07</td></t<>	(1,55)	1:A:58:LEU:H	1:A:63:ASN:O	18	0.07
(1,508)         1:A:21:ALA:HB1         1:A:117:THR:HG22         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB1         1:A:117:THR:HG23         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB2         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB2         1:A:117:THR:HG22         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB2         1:A:117:THR:HG23         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG22         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG23         19         0.07           (1,508)         1:A:20:GLU:HG2         1:A:21:ALA:H         3         0.07           (1,496)         1:A:20:GLU:HG2         1:A:21:ALA:H         3         0.07           (1,490)         1:A:19:GLY:HA2         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,490)         1:A:19:GLY:HA2         1:A:117:THR:HG23         19         0.07           (1,43)         1:A:42:THR:H         1:A:38:TRP:O         4         0.07           (1,43)         1:A:42:THR:H         1:A:38:TRP:	(1,516)	1:A:22:ARG:H	1:A:22:ARG:HD2	16	0.07
(1,508)         1:A:21:ALA:HB1         1:A:117:THR:HG23         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB2         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB2         1:A:117:THR:HG22         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB2         1:A:117:THR:HG23         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG22         19         0.07           (1,508)         1:A:21:ALA:HB3         1:A:117:THR:HG23         19         0.07           (1,496)         1:A:20:GLU:HG2         1:A:21:ALA:H         3         0.07           (1,490)         1:A:19:GLY:HA2         1:A:117:THR:HG21         19         0.07           (1,490)         1:A:19:GLY:HA2         1:A:117:THR:HG22         19         0.07           (1,430)         1:A:42:THR:H         1:A:38:TRP:O         4         0.07           (1,43)         1:A:42:THR:H         1:A:38:TRP:O         13         0.07           (1,427)         1:A:16:ILE:H         1:A:17:PRO:HD2         13         0.07	(1,508)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:117:THR:HG21	19	0.07
(1,508)       1:A:21:ALA:HB2       1:A:117:THR:HG21       19       0.07         (1,508)       1:A:21:ALA:HB2       1:A:117:THR:HG22       19       0.07         (1,508)       1:A:21:ALA:HB2       1:A:117:THR:HG23       19       0.07         (1,508)       1:A:21:ALA:HB3       1:A:117:THR:HG21       19       0.07         (1,508)       1:A:21:ALA:HB3       1:A:117:THR:HG22       19       0.07         (1,508)       1:A:21:ALA:HB3       1:A:117:THR:HG23       19       0.07         (1,496)       1:A:20:GLU:HG2       1:A:21:ALA:H       3       0.07         (1,490)       1:A:19:GLY:HA2       1:A:117:THR:HG21       19       0.07         (1,490)       1:A:19:GLY:HA2       1:A:117:THR:HG22       19       0.07         (1,490)       1:A:19:GLY:HA2       1:A:117:THR:HG23       19       0.07         (1,43)       1:A:42:THR:H       1:A:38:TRP:O       4       0.07         (1,43)       1:A:42:THR:H       1:A:38:TRP:O       13       0.07         (1,427)       1:A:16:ILE:H       1:A:17:PRO:HD2       13       0.07	(1,508)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:117:THR:HG22	19	0.07
(1,508)       1:A:21:ALA:HB2       1:A:117:THR:HG22       19       0.07         (1,508)       1:A:21:ALA:HB2       1:A:117:THR:HG23       19       0.07         (1,508)       1:A:21:ALA:HB3       1:A:117:THR:HG21       19       0.07         (1,508)       1:A:21:ALA:HB3       1:A:117:THR:HG22       19       0.07         (1,508)       1:A:21:ALA:HB3       1:A:117:THR:HG23       19       0.07         (1,496)       1:A:20:GLU:HG2       1:A:21:ALA:H       3       0.07         (1,490)       1:A:19:GLY:HA2       1:A:117:THR:HG21       19       0.07         (1,490)       1:A:19:GLY:HA2       1:A:117:THR:HG22       19       0.07         (1,490)       1:A:19:GLY:HA2       1:A:117:THR:HG23       19       0.07         (1,43)       1:A:42:THR:H       1:A:38:TRP:O       4       0.07         (1,43)       1:A:42:THR:H       1:A:38:TRP:O       13       0.07         (1,427)       1:A:16:ILE:H       1:A:17:PRO:HD2       13       0.07	(1,508)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:117:THR:HG23	19	0.07
(1,508)       1:A:21:ALA:HB2       1:A:117:THR:HG23       19       0.07         (1,508)       1:A:21:ALA:HB3       1:A:117:THR:HG21       19       0.07         (1,508)       1:A:21:ALA:HB3       1:A:117:THR:HG22       19       0.07         (1,508)       1:A:21:ALA:HB3       1:A:117:THR:HG23       19       0.07         (1,496)       1:A:20:GLU:HG2       1:A:21:ALA:H       3       0.07         (1,490)       1:A:19:GLY:HA2       1:A:117:THR:HG21       19       0.07         (1,490)       1:A:19:GLY:HA2       1:A:117:THR:HG22       19       0.07         (1,490)       1:A:19:GLY:HA2       1:A:117:THR:HG23       19       0.07         (1,43)       1:A:42:THR:H       1:A:38:TRP:O       4       0.07         (1,43)       1:A:42:THR:H       1:A:38:TRP:O       13       0.07         (1,427)       1:A:16:ILE:H       1:A:17:PRO:HD2       13       0.07	(1,508)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:117:THR:HG21	19	0.07
(1,508)       1:A:21:ALA:HB3       1:A:117:THR:HG21       19       0.07         (1,508)       1:A:21:ALA:HB3       1:A:117:THR:HG22       19       0.07         (1,508)       1:A:21:ALA:HB3       1:A:117:THR:HG23       19       0.07         (1,496)       1:A:20:GLU:HG2       1:A:21:ALA:H       3       0.07         (1,490)       1:A:19:GLY:HA2       1:A:117:THR:HG21       19       0.07         (1,490)       1:A:19:GLY:HA2       1:A:117:THR:HG22       19       0.07         (1,490)       1:A:19:GLY:HA2       1:A:117:THR:HG23       19       0.07         (1,43)       1:A:42:THR:H       1:A:38:TRP:O       4       0.07         (1,43)       1:A:42:THR:H       1:A:38:TRP:O       13       0.07         (1,427)       1:A:16:ILE:H       1:A:17:PRO:HD2       13       0.07	(1,508)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:117:THR:HG22	19	0.07
(1,508)       1:A:21:ALA:HB3       1:A:117:THR:HG22       19       0.07         (1,508)       1:A:21:ALA:HB3       1:A:117:THR:HG23       19       0.07         (1,496)       1:A:20:GLU:HG2       1:A:21:ALA:H       3       0.07         (1,490)       1:A:19:GLY:HA2       1:A:117:THR:HG21       19       0.07         (1,490)       1:A:19:GLY:HA2       1:A:117:THR:HG22       19       0.07         (1,490)       1:A:19:GLY:HA2       1:A:117:THR:HG23       19       0.07         (1,43)       1:A:42:THR:H       1:A:38:TRP:O       4       0.07         (1,43)       1:A:42:THR:H       1:A:38:TRP:O       13       0.07         (1,427)       1:A:16:ILE:H       1:A:17:PRO:HD2       13       0.07	(1,508)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:117:THR:HG23	19	0.07
(1,508)       1:A:21:ALA:HB3       1:A:117:THR:HG23       19       0.07         (1,496)       1:A:20:GLU:HG2       1:A:21:ALA:H       3       0.07         (1,490)       1:A:19:GLY:HA2       1:A:117:THR:HG21       19       0.07         (1,490)       1:A:19:GLY:HA2       1:A:117:THR:HG22       19       0.07         (1,490)       1:A:19:GLY:HA2       1:A:117:THR:HG23       19       0.07         (1,43)       1:A:42:THR:H       1:A:38:TRP:O       4       0.07         (1,43)       1:A:42:THR:H       1:A:38:TRP:O       13       0.07         (1,427)       1:A:16:ILE:H       1:A:17:PRO:HD2       13       0.07	(1,508)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:117:THR:HG21	19	0.07
(1,496)       1:A:20:GLU:HG2       1:A:21:ALA:H       3       0.07         (1,490)       1:A:19:GLY:HA2       1:A:117:THR:HG21       19       0.07         (1,490)       1:A:19:GLY:HA2       1:A:117:THR:HG22       19       0.07         (1,490)       1:A:19:GLY:HA2       1:A:117:THR:HG23       19       0.07         (1,43)       1:A:42:THR:H       1:A:38:TRP:O       4       0.07         (1,43)       1:A:42:THR:H       1:A:38:TRP:O       13       0.07         (1,427)       1:A:16:ILE:H       1:A:17:PRO:HD2       13       0.07	(1,508)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:117:THR:HG22	19	0.07
(1,490)       1:A:19:GLY:HA2       1:A:117:THR:HG21       19       0.07         (1,490)       1:A:19:GLY:HA2       1:A:117:THR:HG22       19       0.07         (1,490)       1:A:19:GLY:HA2       1:A:117:THR:HG23       19       0.07         (1,43)       1:A:42:THR:H       1:A:38:TRP:O       4       0.07         (1,43)       1:A:42:THR:H       1:A:38:TRP:O       13       0.07         (1,427)       1:A:16:ILE:H       1:A:17:PRO:HD2       13       0.07	(1,508)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:117:THR:HG23	19	0.07
(1,490)       1:A:19:GLY:HA2       1:A:117:THR:HG22       19       0.07         (1,490)       1:A:19:GLY:HA2       1:A:117:THR:HG23       19       0.07         (1,43)       1:A:42:THR:H       1:A:38:TRP:O       4       0.07         (1,43)       1:A:42:THR:H       1:A:38:TRP:O       13       0.07         (1,427)       1:A:16:ILE:H       1:A:17:PRO:HD2       13       0.07	(1,496)	1:A:20:GLU:HG2	1:A:21:ALA:H	3	0.07
(1,490)       1:A:19:GLY:HA2       1:A:117:THR:HG23       19       0.07         (1,43)       1:A:42:THR:H       1:A:38:TRP:O       4       0.07         (1,43)       1:A:42:THR:H       1:A:38:TRP:O       13       0.07         (1,427)       1:A:16:ILE:H       1:A:17:PRO:HD2       13       0.07	(1,490)	1:A:19:GLY:HA2	1:A:117:THR:HG21	19	0.07
(1,43)       1:A:42:THR:H       1:A:38:TRP:O       4       0.07         (1,43)       1:A:42:THR:H       1:A:38:TRP:O       13       0.07         (1,427)       1:A:16:ILE:H       1:A:17:PRO:HD2       13       0.07	(1,490)	1:A:19:GLY:HA2	1:A:117:THR:HG22	19	0.07
(1,43)       1:A:42:THR:H       1:A:38:TRP:O       13       0.07         (1,427)       1:A:16:ILE:H       1:A:17:PRO:HD2       13       0.07		1:A:19:GLY:HA2	1:A:117:THR:HG23	19	0.07
(1,427) 1:A:16:ILE:H 1:A:17:PRO:HD2 13 0.07	(1,43)	1:A:42:THR:H	1:A:38:TRP:O	4	0.07
	(1,43)	1:A:42:THR:H	1:A:38:TRP:O	13	0.07
(1,389) 1:A:14:ARG:H 1:A:23:SER:H 4 0.07	(1,427)	1:A:16:ILE:H	1:A:17:PRO:HD2	13	0.07
	(1,389)	1:A:14:ARG:H	1:A:23:SER:H	4	0.07
(1,389) 1:A:14:ARG:H 1:A:23:SER:H 19 0.07	(1,389)	1:A:14:ARG:H	1:A:23:SER:H	19	0.07
(1,376) 1:A:13:ARG:HA 1:A:22:ARG:HG2 1 0.07	(1,376)	1:A:13:ARG:HA	1:A:22:ARG:HG2	1	0.07
(1,37) 1:A:39:SER:H 1:A:35:ASP:O 15 0.07	(1,37)	1:A:39:SER:H	1:A:35:ASP:O	15	0.07
(1,356) 1:A:12:GLY:H 1:A:23:SER:HG 20 0.07	(1,356)	1:A:12:GLY:H	1:A:23:SER:HG	20	0.07
(1,324) 1:A:11:LEU:HD11 1:A:177:LEU:HB2 14 0.07	(1,324)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HB2	14	0.07
(1,324) 1:A:11:LEU:HD12 1:A:177:LEU:HB2 14 0.07		1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HB2	14	0.07
(1,324) 1:A:11:LEU:HD13 1:A:177:LEU:HB2 14 0.07		1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HB2	14	0.07
(1,321) 1:A:11:LEU:HB2 1:A:24:ILE:HG21 8 0.07		1:A:11:LEU:HB2	1:A:24:ILE:HG21	8	0.07
(1,321) 1:A:11:LEU:HB2 1:A:24:ILE:HG22 8 0.07	(1,321)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:24:ILE:HG22	8	0.07
(1,321) 1:A:11:LEU:HB2 1:A:24:ILE:HG23 8 0.07	, ,	1:A:11:LEU:HB2	1:A:24:ILE:HG23	8	0.07
(1,303) 1:A:11:LEU:H 1:A:177:LEU:HD21 16 0.07		1:A:11:LEU:H	1:A:177:LEU:HD21	16	0.07
(1,303) 1:A:11:LEU:H 1:A:177:LEU:HD22 16 0.07		1:A:11:LEU:H	1:A:177:LEU:HD22	16	0.07
(1,303) 1:A:11:LEU:H 1:A:177:LEU:HD23 16 0.07		1:A:11:LEU:H	1:A:177:LEU:HD23	16	0.07
(1,3) 1:A:10:ALA:H 1:A:25:ILE:O 7 0.07	(1,3)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:O	7	0.07
(1,295) 1:A:10:ALA:HB1 1:A:25:ILE:HD11 20 0.07		1:A:10:ALA:HB1	1:A:25:ILE:HD11	20	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,295)	1:A:10:ALA:HB1	1:A:25:ILE:HD12	20	0.07
(1,295)	1:A:10:ALA:HB1	1:A:25:ILE:HD13	20	0.07
(1,295)	1:A:10:ALA:HB2	1:A:25:ILE:HD11	20	0.07
(1,295)	1:A:10:ALA:HB2	1:A:25:ILE:HD12	20	0.07
(1,295)	1:A:10:ALA:HB2	1:A:25:ILE:HD13	20	0.07
(1,295)	1:A:10:ALA:HB3	1:A:25:ILE:HD11	20	0.07
(1,295)	1:A:10:ALA:HB3	1:A:25:ILE:HD12	20	0.07
(1,295)	1:A:10:ALA:HB3	1:A:25:ILE:HD13	20	0.07
(1,29)	1:A:29:ARG:H	1:A:6:ALA:O	2	0.07
(1,2710)	1:A:180:SER:H	1:A:180:SER:HB2	19	0.07
(1,269)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:174:TRP:HE1	4	0.07
(1,2682)	1:A:177:LEU:HB2	1:A:178:VAL:HG21	14	0.07
(1,2682)	1:A:177:LEU:HB2	1:A:178:VAL:HG22	14	0.07
(1,2682)	1:A:177:LEU:HB2	1:A:178:VAL:HG23	14	0.07
(1,2664)	1:A:177:LEU:H	1:A:177:LEU:HB3	9	0.07
(1,2664)	1:A:177:LEU:H	1:A:177:LEU:HB3	10	0.07
(1,2664)	1:A:177:LEU:H	1:A:177:LEU:HB3	13	0.07
(1,2651)	1:A:175:ALA:HB1	1:A:179:HIS:HD2	15	0.07
(1,2651)	1:A:175:ALA:HB2	1:A:179:HIS:HD2	15	0.07
(1,2651)	1:A:175:ALA:HB3	1:A:179:HIS:HD2	15	0.07
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD21	6	0.07
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD22	6	0.07
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD23	6	0.07
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD21	10	0.07
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD22	10	0.07
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD23	10	0.07
(1,262)	1:A:9:ARG:HG3	1:A:10:ALA:H	1	0.07
(1,2594)	1:A:172:GLU:H	1:A:172:GLU:HG2	6	0.07
(1,2559)	1:A:166:ILE:HG21	1:A:170:ARG:HE	2	0.07
(1,2559)	1:A:166:ILE:HG22	1:A:170:ARG:HE	2	0.07
(1,2559)	1:A:166:ILE:HG23	1:A:170:ARG:HE	2	0.07
(1,2512)	1:A:164:MET:HB2	1:A:167:SER:H	17	0.07
(1,2467)	1:A:160:SER:H	1:A:164:MET:HG2	20	0.07
(1,2466)	1:A:160:SER:H	1:A:164:MET:HE1	4	0.07
(1,2466)	1:A:160:SER:H	1:A:164:MET:HE2	4	0.07
(1,2466)	1:A:160:SER:H	1:A:164:MET:HE3	4	0.07
(1,2434)	1:A:154:ALA:HA	1:A:155:GLU:H	5	0.07
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB1	1:A:154:ALA:H	7	0.07
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB2	1:A:154:ALA:H	7	0.07
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB3	1:A:154:ALA:H	7	0.07
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:150:PRO:HD2	12	0.07
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:150:PRO:HD2	12	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:150:PRO:HD2	12	0.07
(1,2402)	1:A:149:VAL:HB	1:A:152:ASP:H	16	0.07
(1,2385)	1:A:146:GLY:HA2	1:A:147:GLY:H	15	0.07
(1,2381)	1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:PRO:HD2	11	0.07
(1,2381)	1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:PRO:HD2	11	0.07
(1,2381)	1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:PRO:HD2	11	0.07
(1,2352)	1:A:141:ARG:H	1:A:141:ARG:HD2	7	0.07
(1,235)	1:A:8:GLU:HB3	1:A:27:ARG:H	15	0.07
(1,2322)	1:A:139:PHE:HA	1:A:144:LEU:HB2	8	0.07
(1,2315)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HA	18	0.07
(1,2315)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HA	18	0.07
(1,2315)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HA	18	0.07
(1,23)	1:A:26:ILE:H	1:A:112:LEU:O	18	0.07
(1,219)	1:A:7:THR:HG21	1:A:28:GLN:HG2	13	0.07
(1,219)	1:A:7:THR:HG22	1:A:28:GLN:HG2	13	0.07
(1,219)	1:A:7:THR:HG23	1:A:28:GLN:HG2	13	0.07
(1,2102)	1:A:123:VAL:HA	1:A:178:VAL:H	17	0.07
(1,2050)	1:A:120:GLN:HB2	1:A:121:MET:H	19	0.07
(1,1999)	1:A:116:THR:HG21	1:A:121:MET:HB2	2	0.07
(1,1999)	1:A:116:THR:HG22	1:A:121:MET:HB2	2	0.07
(1,1999)	1:A:116:THR:HG23	1:A:121:MET:HB2	2	0.07
(1,1950)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:114:HIS:HB3	10	0.07
(1,1950)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:114:HIS:HB3	10	0.07
(1,1950)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:114:HIS:HB3	10	0.07
(1,1867)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:H	11	0.07
(1,1864)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HB2	5	0.07
(1,1854)	1:A:104:GLU:H	1:A:108:THR:HG21	4	0.07
(1,1854)	1:A:104:GLU:H	1:A:108:THR:HG22	4	0.07
(1,1854)	1:A:104:GLU:H	1:A:108:THR:HG23	4	0.07
(1,185)	1:A:176:ALA:H	1:A:172:GLU:O	8	0.07
(1,1848)	1:A:103:GLU:HG3	1:A:104:GLU:H	9	0.07
(1,1815)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:102:SER:HB2	15	0.07
(1,1815)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:102:SER:HB2	15	0.07
(1,1815)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:102:SER:HB2	15	0.07
(1,1812)	1:A:101:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HA	13	0.07
(1,1812)	1:A:101:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HA	13	0.07
(1,1812)	1:A:101:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HA	13	0.07
(1,181)	1:A:174:TRP:H	1:A:170:ARG:O	5	0.07
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HG	12	0.07
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HG	12	0.07
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HG	12	0.07
(1,1782)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:101:LEU:HG	1	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1782)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:101:LEU:HG	1	0.07
(1,1782)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:101:LEU:HG	1	0.07
(1,1722)	1:A:94:ASP:H	1:A:94:ASP:HB2	11	0.07
(1,1719)	1:A:93:PRO:HA	1:A:94:ASP:H	10	0.07
(1,1719)	1:A:93:PRO:HA	1:A:94:ASP:H	11	0.07
(1,1652)	1:A:87:TRP:HZ2	1:A:121:MET:HE1	14	0.07
(1,1652)	1:A:87:TRP:HZ2	1:A:121:MET:HE2	14	0.07
(1,1652)	1:A:87:TRP:HZ2	1:A:121:MET:HE3	14	0.07
(1,163)	1:A:165:ARG:H	1:A:161:PRO:O	2	0.07
(1,163)	1:A:165:ARG:H	1:A:161:PRO:O	9	0.07
(1,1620)	1:A:85:ILE:HD11	1:A:99:LEU:H	4	0.07
(1,1620)	1:A:85:ILE:HD12	1:A:99:LEU:H	4	0.07
(1,1620)	1:A:85:ILE:HD13	1:A:99:LEU:H	4	0.07
(1,159)	1:A:141:ARG:H	1:A:137:GLY:O	14	0.07
(1,1585)	1:A:83:LEU:HD21	1:A:99:LEU:H	16	0.07
(1,1585)	1:A:83:LEU:HD22	1:A:99:LEU:H	16	0.07
(1,1585)	1:A:83:LEU:HD23	1:A:99:LEU:H	16	0.07
(1,154)	1:A:138:MET:N	1:A:134:ASP:O	9	0.07
(1,1536)	1:A:78:GLU:H	1:A:83:LEU:HD11	2	0.07
(1,1536)	1:A:78:GLU:H	1:A:83:LEU:HD12	2	0.07
(1,1536)	1:A:78:GLU:H	1:A:83:LEU:HD13	2	0.07
(1,1531)	1:A:78:GLU:H	1:A:79:PRO:HD2	8	0.07
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	11	0.07
(1,1498)	1:A:75:LEU:HD11	1:A:84:THR:HG21	4	0.07
(1,1498)	1:A:75:LEU:HD11	1:A:84:THR:HG22	4	0.07
(1,1498)	1:A:75:LEU:HD11	1:A:84:THR:HG23	4	0.07
(1,1498)	1:A:75:LEU:HD12	1:A:84:THR:HG21	4	0.07
(1,1498)	1:A:75:LEU:HD12	1:A:84:THR:HG22	4	0.07
(1,1498)	1:A:75:LEU:HD12	1:A:84:THR:HG23	4	0.07
(1,1498)	1:A:75:LEU:HD13	1:A:84:THR:HG21	4	0.07
(1,1498)	1:A:75:LEU:HD13	1:A:84:THR:HG22	4	0.07
(1,1498)	1:A:75:LEU:HD13	1:A:84:THR:HG23	4	0.07
(1,1443)	1:A:71:SER:H	1:A:87:TRP:HA	1	0.07
(1,1407)	1:A:67:GLN:HA	1:A:68:GLY:H	19	0.07
(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	2	0.07
(1,1337)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HG21	18	0.07
(1,1337)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HG22	18	0.07
(1,1337)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HG23	18	0.07
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD11	3	0.07
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD12	3	0.07
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD13	3	0.07
(1,1328)	1:A:60:GLU:HG3	1:A:61:GLY:H	4	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1327)	1:A:60:GLU:HG2	1:A:61:GLY:H	2	0.07
(1,131)	1:A:127:VAL:H	1:A:123:VAL:O	8	0.07
(1,1287)	1:A:56:GLY:HA2	1:A:65:ALA:H	18	0.07
(1,1255)	1:A:54:PRO:HB2	1:A:64:PHE:HB2	14	0.07
(1,1243)	1:A:53:GLU:H	1:A:54:PRO:HD2	18	0.07
(1,124)	1:A:123:VAL:N	1:A:119:GLU:O	9	0.07
(1,1239)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:68:GLY:H	20	0.07
(1,1239)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:68:GLY:H	20	0.07
(1,1239)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:68:GLY:H	20	0.07
(1,123)	1:A:123:VAL:H	1:A:119:GLU:O	13	0.07
(1,119)	1:A:116:THR:H	1:A:22:ARG:O	9	0.07
(1,1171)	1:A:50:TRP:HE1	1:A:136:LEU:HG	5	0.07
(1,1122)	1:A:46:ARG:HG2	1:A:47:ILE:H	16	0.07
(1,1104)	1:A:46:ARG:H	1:A:47:ILE:HG12	10	0.07
(1,105)	1:A:109:LEU:H	1:A:102:SER:O	14	0.07
(1,1033)	1:A:40:ALA:HA	1:A:46:ARG:HB3	7	0.07
(1,103)	1:A:104:GLU:H	1:A:107:GLY:O	13	0.07
(1,101)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:O	9	0.07
(1,101)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:O	18	0.07
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD11	9	0.07
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD12	9	0.07
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD13	9	0.07
(1,976)	1:A:38:TRP:H	1:A:108:THR:HG21	1	0.06
(1,976)	1:A:38:TRP:H	1:A:108:THR:HG22	1	0.06
(1,976)	1:A:38:TRP:H	1:A:108:THR:HG23	1	0.06
(1,97)	1:A:100:ARG:H	1:A:111:GLU:O	15	0.06
(1,929)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:39:SER:H	16	0.06
(1,91)	1:A:97:VAL:H	1:A:85:ILE:O	5	0.06
(1,897)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:37:VAL:H	20	0.06
(1,897)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:37:VAL:H	20	0.06
(1,897)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:37:VAL:H	20	0.06
(1,896)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:36:GLU:H	12	0.06
(1,896)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:36:GLU:H	12	0.06
(1,896)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:36:GLU:H	12	0.06
(1,893)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:H	19	0.06
(1,893)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:H	19	0.06
(1,893)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:H	19	0.06
(1,867)	1:A:34:VAL:H	1:A:103:GLU:HA	20	0.06
(1,85)	1:A:87:TRP:H	1:A:95:SER:O	6	0.06
(1,848)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:H	18	0.06
(1,848)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:H	18	0.06
(1,848)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:H	18	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,845)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:33:PRO:HD3	11	0.06
(1,845)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:33:PRO:HD3	11	0.06
(1,845)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:33:PRO:HD3	11	0.06
(1,845)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:33:PRO:HD3	14	0.06
(1,845)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:33:PRO:HD3	14	0.06
(1,845)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:33:PRO:HD3	14	0.06
(1,837)	1:A:32:ALA:H	1:A:33:PRO:HD2	4	0.06
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	14	0.06
(1,767)	1:A:29:ARG:HE	1:A:104:GLU:HG2	12	0.06
(1,746)	1:A:28:GLN:HG3	1:A:29:ARG:H	1	0.06
(1,746)	1:A:28:GLN:HG3	1:A:29:ARG:H	12	0.06
(1,746)	1:A:28:GLN:HG3	1:A:29:ARG:H	15	0.06
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD21	16	0.06
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD22	16	0.06
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD23	16	0.06
(1,726)	1:A:27:ARG:HG3	1:A:28:GLN:H	6	0.06
(1,726)	1:A:27:ARG:HG3	1:A:28:GLN:H	15	0.06
(1,726)	1:A:27:ARG:HG3	1:A:28:GLN:H	16	0.06
(1,721)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:111:GLU:HG2	5	0.06
(1,721)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:111:GLU:HG2	6	0.06
(1,721)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:111:GLU:HG2	16	0.06
(1,7)	1:A:14:ARG:H	1:A:21:ALA:O	6	0.06
(1,580)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:125:VAL:HG21	9	0.06
(1,580)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:125:VAL:HG22	9	0.06
(1,580)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:125:VAL:HG23	9	0.06
(1,580)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:125:VAL:HG21	10	0.06
(1,580)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:125:VAL:HG22	10	0.06
(1,580)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:125:VAL:HG23	10	0.06
(1,55)	1:A:58:LEU:H	1:A:63:ASN:O	12	0.06
(1,501)	1:A:21:ALA:HA	1:A:117:THR:HG21	4	0.06
(1,501)	1:A:21:ALA:HA	1:A:117:THR:HG22	4	0.06
(1,501)	1:A:21:ALA:HA	1:A:117:THR:HG23	4	0.06
(1,5)	1:A:12:GLY:H	1:A:23:SER:O	8	0.06
(1,494)	1:A:20:GLU:H	1:A:20:GLU:HG2	15	0.06
(1,494)	1:A:20:GLU:H	1:A:20:GLU:HG2	16	0.06
(1,47)	1:A:47:ILE:H	1:A:43:ASP:O	12	0.06
(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG21	8	0.06
(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG22	8	0.06
(1,410)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:16:ILE:HG23	8	0.06
(1,39)	1:A:40:ALA:H	1:A:36:GLU:O	4	0.06
(1,370)	1:A:13:ARG:H	1:A:25:ILE:HD11	8	0.06
(1,370)	1:A:13:ARG:H	1:A:25:ILE:HD12	8	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,370)	1:A:13:ARG:H	1:A:25:ILE:HD13	8	0.06
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD11	9	0.06
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD12	9	0.06
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD13	9	0.06
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD11	14	0.06
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD12	14	0.06
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD13	14	0.06
(1,356)	1:A:12:GLY:H	1:A:23:SER:HG	12	0.06
(1,355)	1:A:12:GLY:H	1:A:23:SER:H	12	0.06
(1,338)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:174:TRP:HH2	18	0.06
(1,338)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:174:TRP:HH2	18	0.06
(1,338)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:174:TRP:HH2	18	0.06
(1,33)	1:A:37:VAL:H	1:A:33:PRO:O	1	0.06
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD11	12	0.06
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD12	12	0.06
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD13	12	0.06
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD11	12	0.06
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD12	12	0.06
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD13	12	0.06
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD11	12	0.06
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD12	12	0.06
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD13	12	0.06
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD11	18	0.06
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD12	18	0.06
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD13	18	0.06
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD11	18	0.06
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD12	18	0.06
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD13	18	0.06
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD11	18	0.06
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD12	18	0.06
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD13	18	0.06
(1,323)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:12:GLY:H	10	0.06
(1,323)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:12:GLY:H	10	0.06
(1,323)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:12:GLY:H	10	0.06
(1,3)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:O	17	0.06
(1,3)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:O	19	0.06
(1,2659)	1:A:176:ALA:HA	1:A:179:HIS:HB3	8	0.06
(1,2651)	1:A:175:ALA:HB1	1:A:179:HIS:HD2	19	0.06
(1,2651)	1:A:175:ALA:HB2	1:A:179:HIS:HD2	19	0.06
(1,2651)	1:A:175:ALA:HB3	1:A:179:HIS:HD2	19	0.06
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD21	11	0.06
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD22	11	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD23	11	0.06
(1,257)	1:A:9:ARG:HE	1:A:174:TRP:HD1	5	0.06
(1,2557)	1:A:166:ILE:HG21	1:A:167:SER:HB2	3	0.06
(1,2557)	1:A:166:ILE:HG22	1:A:167:SER:HB2	3	0.06
(1,2557)	1:A:166:ILE:HG23	1:A:167:SER:HB2	3	0.06
(1,2557)	1:A:166:ILE:HG21	1:A:167:SER:HB2	6	0.06
(1,2557)	1:A:166:ILE:HG22	1:A:167:SER:HB2	6	0.06
(1,2557)	1:A:166:ILE:HG23	1:A:167:SER:HB2	6	0.06
(1,2548)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:169:GLU:HB2	9	0.06
(1,2548)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:169:GLU:HB3	9	0.06
(1,2548)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:169:GLU:HB2	9	0.06
(1,2548)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:169:GLU:HB3	9	0.06
(1,2548)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:169:GLU:HB2	9	0.06
(1,2548)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:169:GLU:HB3	9	0.06
(1,2518)	1:A:164:MET:HG2	1:A:165:ARG:H	1	0.06
(1,2518)	1:A:164:MET:HG2	1:A:165:ARG:H	8	0.06
(1,2518)	1:A:164:MET:HG2	1:A:165:ARG:H	11	0.06
(1,2518)	1:A:164:MET:HG2	1:A:165:ARG:H	13	0.06
(1,2507)	1:A:164:MET:H	1:A:164:MET:HG2	12	0.06
(1,2503)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HG21	18	0.06
(1,2503)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HG22	18	0.06
(1,2503)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HG23	18	0.06
(1,2503)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HG21	18	0.06
(1,2503)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HG22	18	0.06
(1,2503)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HG23	18	0.06
(1,2503)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HG21	18	0.06
(1,2503)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HG22	18	0.06
(1,2503)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HG23	18	0.06
(1,2466)	1:A:160:SER:H	1:A:164:MET:HE1	7	0.06
(1,2466)	1:A:160:SER:H	1:A:164:MET:HE2	7	0.06
(1,2466)	1:A:160:SER:H	1:A:164:MET:HE3	7	0.06
(1,2465)	1:A:159:PRO:HG2	1:A:160:SER:H	12	0.06
(1,2452)	1:A:157:PHE:HA	1:A:158:GLU:H	13	0.06
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB1	1:A:155:GLU:H	11	0.06
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB2	1:A:155:GLU:H	11	0.06
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB3	1:A:155:GLU:H	11	0.06
(1,2431)	1:A:153:ALA:HA	1:A:154:ALA:H	17	0.06
(1,2431)	1:A:153:ALA:HA	1:A:154:ALA:H	19	0.06
(1,2420)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:152:ASP:H	4	0.06
(1,2383)	1:A:145:PRO:HB2	1:A:146:GLY:H	9	0.06
(1,2380)	1:A:144:LEU:HB2	1:A:145:PRO:HD2	9	0.06
(1,2367)	1:A:143:ASP:H	1:A:144:LEU:HB2	19	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2315)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HA	9	0.06
(1,2315)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HA	9	0.06
(1,2315)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HA	9	0.06
(1,2288)	1:A:136:LEU:HD11	1:A:139:PHE:HD1	15	0.06
(1,2288)	1:A:136:LEU:HD11	1:A:139:PHE:HD2	15	0.06
(1,2288)	1:A:136:LEU:HD12	1:A:139:PHE:HD1	15	0.06
(1,2288)	1:A:136:LEU:HD12	1:A:139:PHE:HD2	15	0.06
(1,2288)	1:A:136:LEU:HD13	1:A:139:PHE:HD1	15	0.06
(1,2288)	1:A:136:LEU:HD13	1:A:139:PHE:HD2	15	0.06
(1,2276)	1:A:135:PHE:HE1	1:A:138:MET:HE1	10	0.06
(1,2276)	1:A:135:PHE:HE1	1:A:138:MET:HE2	10	0.06
(1,2276)	1:A:135:PHE:HE1	1:A:138:MET:HE3	10	0.06
(1,2276)	1:A:135:PHE:HE1	1:A:138:MET:HE1	15	0.06
(1,2276)	1:A:135:PHE:HE1	1:A:138:MET:HE2	15	0.06
(1,2276)	1:A:135:PHE:HE1	1:A:138:MET:HE3	15	0.06
(1,2262)	1:A:133:LEU:HD11	1:A:136:LEU:HD11	14	0.06
(1,2262)	1:A:133:LEU:HD11	1:A:136:LEU:HD12	14	0.06
(1,2262)	1:A:133:LEU:HD11	1:A:136:LEU:HD13	14	0.06
(1,2262)	1:A:133:LEU:HD12	1:A:136:LEU:HD11	14	0.06
(1,2262)	1:A:133:LEU:HD12	1:A:136:LEU:HD12	14	0.06
(1,2262)	1:A:133:LEU:HD12	1:A:136:LEU:HD13	14	0.06
(1,2262)	1:A:133:LEU:HD13	1:A:136:LEU:HD11	14	0.06
(1,2262)	1:A:133:LEU:HD13	1:A:136:LEU:HD12	14	0.06
(1,2262)	1:A:133:LEU:HD13	1:A:136:LEU:HD13	14	0.06
(1,2229)	1:A:131:MET:HE1	1:A:132:ALA:H	5	0.06
(1,2229)	1:A:131:MET:HE2	1:A:132:ALA:H	5	0.06
(1,2229)	1:A:131:MET:HE3	1:A:132:ALA:H	5	0.06
(1,2191)	1:A:127:VAL:HG21	1:A:174:TRP:H	19	0.06
(1,2191)	1:A:127:VAL:HG22	1:A:174:TRP:H	19	0.06
(1,2191)	1:A:127:VAL:HG23	1:A:174:TRP:H	19	0.06
(1,2161)	1:A:126:GLY:HA2	1:A:174:TRP:HZ3	9	0.06
(1,2133)	1:A:124:GLU:HA	1:A:127:VAL:HB	19	0.06
(1,2116)	1:A:123:VAL:HG11	1:A:175:ALA:HA	7	0.06
(1,2116)	1:A:123:VAL:HG12	1:A:175:ALA:HA	7	0.06
(1,2116)	1:A:123:VAL:HG13	1:A:175:ALA:HA	7	0.06
(1,2107)	1:A:123:VAL:HG11	1:A:126:GLY:H	1	0.06
(1,2107)	1:A:123:VAL:HG12	1:A:126:GLY:H	1	0.06
(1,2107)	1:A:123:VAL:HG13	1:A:126:GLY:H	1	0.06
(1,2030)	1:A:119:GLU:HA	1:A:122:LEU:HD11	10	0.06
(1,2030)	1:A:119:GLU:HA	1:A:122:LEU:HD12	10	0.06
(1,2030)	1:A:119:GLU:HA	1:A:122:LEU:HD13	10	0.06
(1,201)	1:A:6:ALA:H	1:A:29:ARG:H	9	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1948)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:113:GLU:H	11	0.06
(1,1948)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:113:GLU:H	11	0.06
(1,1948)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:113:GLU:H	11	0.06
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HD21	6	0.06
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HD22	6	0.06
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HD23	6	0.06
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HD21	6	0.06
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HD22	6	0.06
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HD23	6	0.06
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HD21	6	0.06
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HD22	6	0.06
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HD23	6	0.06
(1,1920)	1:A:110:LEU:HG	1:A:136:LEU:HD21	6	0.06
(1,1920)	1:A:110:LEU:HG	1:A:136:LEU:HD22	6	0.06
(1,1920)	1:A:110:LEU:HG	1:A:136:LEU:HD23	6	0.06
(1,191)	1:A:179:HIS:H	1:A:175:ALA:O	7	0.06
(1,191)	1:A:179:HIS:H	1:A:175:ALA:O	8	0.06
(1,189)	1:A:178:VAL:H	1:A:174:TRP:O	13	0.06
(1,187)	1:A:177:LEU:H	1:A:173:ALA:O	10	0.06
(1,1859)	1:A:104:GLU:HA	1:A:107:GLY:H	10	0.06
(1,1859)	1:A:104:GLU:HA	1:A:107:GLY:H	14	0.06
(1,185)	1:A:176:ALA:H	1:A:172:GLU:O	2	0.06
(1,180)	1:A:173:ALA:N	1:A:169:GLU:O	5	0.06
(1,179)	1:A:173:ALA:H	1:A:169:GLU:O	8	0.06
(1,175)	1:A:171:GLY:H	1:A:167:SER:O	13	0.06
(1,1731)	1:A:96:GLU:H	1:A:114:HIS:HD2	8	0.06
(1,1731)	1:A:96:GLU:H	1:A:114:HIS:HD2	15	0.06
(1,1715)	1:A:92:LYS:HE2	1:A:121:MET:HE1	11	0.06
(1,1715)	1:A:92:LYS:HE2	1:A:121:MET:HE2	11	0.06
(1,1715)	1:A:92:LYS:HE2	1:A:121:MET:HE3	11	0.06
(1,1706)	1:A:92:LYS:H	1:A:92:LYS:HD2	12	0.06
(1,1697)	1:A:90:GLU:HA	1:A:91:GLY:H	6	0.06
(1,169)	1:A:168:GLN:H	1:A:164:MET:O	12	0.06
(1,1681)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:HG2	1	0.06
(1,1681)	1:A:89:TYR:HB2	1:A:92:LYS:HG2	6	0.06
(1,167)	1:A:167:SER:H	1:A:163:MET:O	19	0.06
(1,1652)	1:A:87:TRP:HZ2	1:A:121:MET:HE1	2	0.06
(1,1652)	1:A:87:TRP:HZ2	1:A:121:MET:HE2	2	0.06
(1,1652)	1:A:87:TRP:HZ2	1:A:121:MET:HE3	2	0.06
(1,1652)	1:A:87:TRP:HZ2	1:A:121:MET:HE1	13	0.06
(1,1652)	1:A:87:TRP:HZ2	1:A:121:MET:HE2	13	0.06
(1,1652)	1:A:87:TRP:HZ2	1:A:121:MET:HE3	13	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,16)	1:A:22:ARG:N	1:A:116:THR:O	2	0.06
(1,159)	1:A:141:ARG:H	1:A:137:GLY:O	7	0.06
(1,1575)	1:A:83:LEU:H	1:A:99:LEU:HB2	15	0.06
(1,1569)	1:A:82:ARG:HD2	1:A:100:ARG:HB2	4	0.06
(1,153)	1:A:138:MET:H	1:A:134:ASP:O	10	0.06
(1,1507)	1:A:75:LEU:HD21	1:A:86:SER:HB2	3	0.06
(1,1507)	1:A:75:LEU:HD22	1:A:86:SER:HB2	3	0.06
(1,1507)	1:A:75:LEU:HD23	1:A:86:SER:HB2	3	0.06
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	8	0.06
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	14	0.06
(1,1443)	1:A:71:SER:H	1:A:87:TRP:HA	5	0.06
(1,1443)	1:A:71:SER:H	1:A:87:TRP:HA	20	0.06
(1,1441)	1:A:70:ALA:HB1	1:A:89:TYR:HE1	17	0.06
(1,1441)	1:A:70:ALA:HB2	1:A:89:TYR:HE1	17	0.06
(1,1441)	1:A:70:ALA:HB3	1:A:89:TYR:HE1	17	0.06
(1,144)	1:A:133:LEU:N	1:A:129:TRP:O	14	0.06
(1,1426)	1:A:70:ALA:H	1:A:89:TYR:HD1	14	0.06
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA2	9	0.06
(1,1413)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:H	18	0.06
(1,141)	1:A:132:ALA:H	1:A:128:GLY:O	3	0.06
(1,138)	1:A:130:GLU:N	1:A:126:GLY:O	12	0.06
(1,13)	1:A:21:ALA:H	1:A:14:ARG:O	9	0.06
(1,1299)	1:A:58:LEU:H	1:A:59:ARG:HG2	20	0.06
(1,129)	1:A:126:GLY:H	1:A:122:LEU:O	1	0.06
(1,1243)	1:A:53:GLU:H	1:A:54:PRO:HD2	4	0.06
(1,1243)	1:A:53:GLU:H	1:A:54:PRO:HD2	11	0.06
(1,123)	1:A:123:VAL:H	1:A:119:GLU:O	18	0.06
(1,1226)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:69:ASN:HD21	16	0.06
(1,1226)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:69:ASN:HD21	16	0.06
(1,1226)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:69:ASN:HD21	16	0.06
(1,1203)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:129:TRP:HZ3	13	0.06
(1,1192)	1:A:51:PHE:HZ	1:A:129:TRP:HH2	7	0.06
(1,119)	1:A:116:THR:H	1:A:22:ARG:O	8	0.06
(1,1173)	1:A:50:TRP:HE3	1:A:132:ALA:HB1	14	0.06
(1,1173)	1:A:50:TRP:HE3	1:A:132:ALA:HB2	14	0.06
(1,1173)	1:A:50:TRP:HE3	1:A:132:ALA:HB3	14	0.06
(1,1170)	1:A:50:TRP:H	1:A:51:PHE:H	19	0.06
(1,115)	1:A:114:HIS:H	1:A:24:ILE:O	4	0.06
(1,115)	1:A:114:HIS:H	1:A:24:ILE:O	15	0.06
(1,1113)	1:A:46:ARG:HB2	1:A:139:PHE:HZ	5	0.06
(1,1100)	1:A:45:ASN:HB2	1:A:47:ILE:H	7	0.06
(1,1097)	1:A:45:ASN:HA	1:A:48:ASN:HD22	19	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1055)	1:A:41:CYS:HA	1:A:50:TRP:HZ2	16	0.06
(1,1035)	1:A:40:ALA:HA	1:A:46:ARG:HD3	19	0.06
(1,1024)	1:A:39:SER:HB2	1:A:46:ARG:HD2	18	0.06
(1,102)	1:A:102:SER:N	1:A:109:LEU:O	7	0.06
(1,102)	1:A:102:SER:N	1:A:109:LEU:O	15	0.06
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD11	14	0.06
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD12	14	0.06
(1,1003)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:99:LEU:HD13	14	0.06
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD11	6	0.06
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD12	6	0.06
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD13	6	0.06
(1,1001)	1:A:38:TRP:HE1	1:A:79:PRO:HG2	6	0.06
(1,980)	1:A:38:TRP:H	1:A:39:SER:HB2	19	0.05
(1,975)	1:A:38:TRP:H	1:A:101:LEU:HD21	2	0.05
(1,975)	1:A:38:TRP:H	1:A:101:LEU:HD22	2	0.05
(1,975)	1:A:38:TRP:H	1:A:101:LEU:HD23	2	0.05
(1,97)	1:A:100:ARG:H	1:A:111:GLU:O	10	0.05
(1,968)	1:A:37:VAL:HG21	1:A:108:THR:HA	1	0.05
(1,968)	1:A:37:VAL:HG22	1:A:108:THR:HA	1	0.05
(1,968)	1:A:37:VAL:HG23	1:A:108:THR:HA	1	0.05
(1,906)	1:A:34:VAL:HG21	1:A:102:SER:HA	17	0.05
(1,906)	1:A:34:VAL:HG22	1:A:102:SER:HA	17	0.05
(1,906)	1:A:34:VAL:HG23	1:A:102:SER:HA	17	0.05
(1,904)	1:A:34:VAL:HG21	1:A:101:LEU:H	16	0.05
(1,904)	1:A:34:VAL:HG22	1:A:101:LEU:H	16	0.05
(1,904)	1:A:34:VAL:HG23	1:A:101:LEU:H	16	0.05
(1,895)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:HB2	11	0.05
(1,895)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:HB2	11	0.05
(1,895)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:HB2	11	0.05
(1,869)	1:A:34:VAL:H	1:A:103:GLU:HG3	12	0.05
(1,867)	1:A:34:VAL:H	1:A:103:GLU:HA	6	0.05
(1,850)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:HG2	3	0.05
(1,850)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:HG2	3	0.05
(1,850)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:HG2	3	0.05
(1,848)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:H	7	0.05
(1,848)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:H	7	0.05
(1,848)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:H	7	0.05
(1,841)	1:A:32:ALA:HA	1:A:36:GLU:HB2	8	0.05
(1,83)	1:A:86:SER:H	1:A:73:ASP:O	9	0.05
(1,825)	1:A:31:ASP:HA	1:A:107:GLY:H	18	0.05
(1,821)	1:A:31:ASP:H	1:A:140:ILE:HG21	2	0.05
(1,821)	1:A:31:ASP:H	1:A:140:ILE:HG22	2	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,821)	1:A:31:ASP:H	1:A:140:ILE:HG23	2	0.05
(1,821)	1:A:31:ASP:H	1:A:140:ILE:HG21	4	0.05
(1,821)	1:A:31:ASP:H	1:A:140:ILE:HG22	4	0.05
(1,821)	1:A:31:ASP:H	1:A:140:ILE:HG23	4	0.05
(1,821)	1:A:31:ASP:H	1:A:140:ILE:HG21	5	0.05
(1,821)	1:A:31:ASP:H	1:A:140:ILE:HG22	5	0.05
(1,821)	1:A:31:ASP:H	1:A:140:ILE:HG23	5	0.05
(1,773)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:30:TYR:H	6	0.05
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD11	19	0.05
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD12	19	0.05
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD13	19	0.05
(1,746)	1:A:28:GLN:HG3	1:A:29:ARG:H	6	0.05
(1,745)	1:A:28:GLN:HG2	1:A:29:ARG:H	4	0.05
(1,744)	1:A:28:GLN:HE22	1:A:133:LEU:HD21	8	0.05
(1,744)	1:A:28:GLN:HE22	1:A:133:LEU:HD22	8	0.05
(1,744)	1:A:28:GLN:HE22	1:A:133:LEU:HD23	8	0.05
(1,721)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:111:GLU:HG2	20	0.05
(1,71)	1:A:76:ARG:H	1:A:84:THR:O	8	0.05
(1,704)	1:A:26:ILE:HG21	1:A:28:GLN:HE22	11	0.05
(1,704)	1:A:26:ILE:HG22	1:A:28:GLN:HE22	11	0.05
(1,704)	1:A:26:ILE:HG23	1:A:28:GLN:HE22	11	0.05
(1,673)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:112:LEU:HD11	5	0.05
(1,673)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:112:LEU:HD12	5	0.05
(1,673)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:112:LEU:HD13	5	0.05
(1,673)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:112:LEU:HD11	5	0.05
(1,673)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:112:LEU:HD12	5	0.05
(1,673)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:112:LEU:HD13	5	0.05
(1,673)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:112:LEU:HD11	5	0.05
(1,673)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:112:LEU:HD12	5	0.05
(1,673)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:112:LEU:HD13	5	0.05
(1,67)	1:A:72:GLY:H	1:A:64:PHE:O	1	0.05
(1,651)	1:A:25:ILE:HG21	1:A:27:ARG:HE	6	0.05
(1,651)	1:A:25:ILE:HG22	1:A:27:ARG:HE	6	0.05
(1,651)	1:A:25:ILE:HG23	1:A:27:ARG:HE	6	0.05
(1,65)	1:A:71:SER:H	1:A:88:VAL:O	13	0.05
(1,65)	1:A:71:SER:H	1:A:88:VAL:O	16	0.05
(1,65)	1:A:71:SER:H	1:A:88:VAL:O	17	0.05
(1,63)	1:A:65:ALA:H	1:A:55:LYS:O	12	0.05
(1,600)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:174:TRP:HZ3	14	0.05
(1,580)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:125:VAL:HG21	17	0.05
(1,580)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:125:VAL:HG22	17	0.05
(1,580)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:125:VAL:HG23	17	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,57)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:O	10	0.05
(1,56)	1:A:58:LEU:N	1:A:63:ASN:O	11	0.05
(1,55)	1:A:58:LEU:H	1:A:63:ASN:O	6	0.05
(1,55)	1:A:58:LEU:H	1:A:63:ASN:O	10	0.05
(1,55)	1:A:58:LEU:H	1:A:63:ASN:O	20	0.05
(1,532)	1:A:22:ARG:HG2	1:A:23:SER:H	7	0.05
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG21	6	0.05
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG22	6	0.05
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG23	6	0.05
(1,43)	1:A:42:THR:H	1:A:38:TRP:O	11	0.05
(1,43)	1:A:42:THR:H	1:A:38:TRP:O	17	0.05
(1,400)	1:A:14:ARG:HE	1:A:16:ILE:HG21	3	0.05
(1,400)	1:A:14:ARG:HE	1:A:16:ILE:HG22	3	0.05
(1,400)	1:A:14:ARG:HE	1:A:16:ILE:HG23	3	0.05
(1,331)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:180:SER:H	10	0.05
(1,331)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:180:SER:H	10	0.05
(1,331)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:180:SER:H	10	0.05
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD11	17	0.05
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD12	17	0.05
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD13	17	0.05
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD11	17	0.05
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD12	17	0.05
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD13	17	0.05
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD11	17	0.05
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD12	17	0.05
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD13	17	0.05
(1,323)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:12:GLY:H	19	0.05
(1,323)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:12:GLY:H	19	0.05
(1,323)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:12:GLY:H	19	0.05
(1,304)	1:A:11:LEU:H	1:A:25:ILE:HB	6	0.05
(1,302)	1:A:11:LEU:H	1:A:177:LEU:HD11	8	0.05
(1,302)	1:A:11:LEU:H	1:A:177:LEU:HD12	8	0.05
(1,302)	1:A:11:LEU:H	1:A:177:LEU:HD13	8	0.05
(1,30)	1:A:29:ARG:N	1:A:6:ALA:O	15	0.05
(1,3)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:O	11	0.05
(1,295)	1:A:10:ALA:HB1	1:A:25:ILE:HD11	14	0.05
(1,295)	1:A:10:ALA:HB1	1:A:25:ILE:HD12	14	0.05
(1,295)	1:A:10:ALA:HB1	1:A:25:ILE:HD13	14	0.05
(1,295)	1:A:10:ALA:HB2	1:A:25:ILE:HD11	14	0.05
(1,295)	1:A:10:ALA:HB2	1:A:25:ILE:HD12	14	0.05
(1,295)	1:A:10:ALA:HB2	1:A:25:ILE:HD13	14	0.05
(1,295)	1:A:10:ALA:HB3	1:A:25:ILE:HD11	14	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,295)	1:A:10:ALA:HB3	1:A:25:ILE:HD12	14	0.05
(1,295)	1:A:10:ALA:HB3	1:A:25:ILE:HD13	14	0.05
(1,293)	1:A:10:ALA:HB1	1:A:177:LEU:HD21	16	0.05
(1,293)	1:A:10:ALA:HB1	1:A:177:LEU:HD22	16	0.05
(1,293)	1:A:10:ALA:HB1	1:A:177:LEU:HD23	16	0.05
(1,293)	1:A:10:ALA:HB2	1:A:177:LEU:HD21	16	0.05
(1,293)	1:A:10:ALA:HB2	1:A:177:LEU:HD22	16	0.05
(1,293)	1:A:10:ALA:HB2	1:A:177:LEU:HD23	16	0.05
(1,293)	1:A:10:ALA:HB3	1:A:177:LEU:HD21	16	0.05
(1,293)	1:A:10:ALA:HB3	1:A:177:LEU:HD22	16	0.05
(1,293)	1:A:10:ALA:HB3	1:A:177:LEU:HD23	16	0.05
(1,29)	1:A:29:ARG:H	1:A:6:ALA:O	14	0.05
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD11	15	0.05
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD12	15	0.05
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD13	15	0.05
(1,2714)	1:A:181:GLY:HA2	1:A:182:SER:H	1	0.05
(1,2714)	1:A:181:GLY:HA2	1:A:182:SER:H	2	0.05
(1,2714)	1:A:181:GLY:HA2	1:A:182:SER:H	18	0.05
(1,2713)	1:A:181:GLY:H	1:A:182:SER:H	11	0.05
(1,2710)	1:A:180:SER:H	1:A:180:SER:HB2	16	0.05
(1,2664)	1:A:177:LEU:H	1:A:177:LEU:HB3	18	0.05
(1,2641)	1:A:175:ALA:HA	1:A:178:VAL:HA	1	0.05
(1,2641)	1:A:175:ALA:HA	1:A:178:VAL:HA	5	0.05
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD21	19	0.05
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD22	19	0.05
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD23	19	0.05
(1,262)	1:A:9:ARG:HG3	1:A:10:ALA:H	12	0.05
(1,260)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:10:ALA:H	19	0.05
(1,2594)	1:A:172:GLU:H	1:A:172:GLU:HG2	20	0.05
(1,2572)	1:A:168:GLN:HG2	1:A:168:GLN:HE21	3	0.05
(1,2566)	1:A:168:GLN:HA	1:A:168:GLN:HE21	9	0.05
(1,2563)	1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HE21	9	0.05
(1,2518)	1:A:164:MET:HG2	1:A:165:ARG:H	16	0.05
(1,2513)	1:A:164:MET:HE1	1:A:165:ARG:H	10	0.05
(1,2513)	1:A:164:MET:HE2	1:A:165:ARG:H	10	0.05
(1,2513)	1:A:164:MET:HE3	1:A:165:ARG:H	10	0.05
(1,2465)	1:A:159:PRO:HG2	1:A:160:SER:H	8	0.05
(1,2452)	1:A:157:PHE:HA	1:A:158:GLU:H	5	0.05
(1,2452)	1:A:157:PHE:HA	1:A:158:GLU:H	10	0.05
(1,2452)	1:A:157:PHE:HA	1:A:158:GLU:H	14	0.05
(1,2446)	1:A:156:GLU:HA	1:A:157:PHE:H	1	0.05
(1,2446)	1:A:156:GLU:HA	1:A:157:PHE:H	14	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB1	1:A:155:GLU:H	4	0.05
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB2	1:A:155:GLU:H	4	0.05
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB3	1:A:155:GLU:H	4	0.05
(1,2431)	1:A:153:ALA:HA	1:A:154:ALA:H	1	0.05
(1,2392)	1:A:148:PRO:HD2	1:A:149:VAL:H	7	0.05
(1,2389)	1:A:147:GLY:HA2	1:A:148:PRO:HG2	15	0.05
(1,2385)	1:A:146:GLY:HA2	1:A:147:GLY:H	6	0.05
(1,2382)	1:A:145:PRO:HA	1:A:146:GLY:H	15	0.05
(1,2375)	1:A:144:LEU:H	1:A:145:PRO:HD2	20	0.05
(1,235)	1:A:8:GLU:HB3	1:A:27:ARG:H	6	0.05
(1,235)	1:A:8:GLU:HB3	1:A:27:ARG:H	12	0.05
(1,2344)	1:A:140:ILE:HA	1:A:142:GLY:H	1	0.05
(1,2335)	1:A:139:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HG	14	0.05
(1,2335)	1:A:139:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HG	14	0.05
(1,2314)	1:A:138:MET:HE1	1:A:143:ASP:HB3	10	0.05
(1,2314)	1:A:138:MET:HE2	1:A:143:ASP:HB3	10	0.05
(1,2314)	1:A:138:MET:HE3	1:A:143:ASP:HB3	10	0.05
(1,2313)	1:A:138:MET:HE1	1:A:143:ASP:HB2	2	0.05
(1,2313)	1:A:138:MET:HE2	1:A:143:ASP:HB2	2	0.05
(1,2313)	1:A:138:MET:HE3	1:A:143:ASP:HB2	2	0.05
(1,2313)	1:A:138:MET:HE1	1:A:143:ASP:HB2	11	0.05
(1,2313)	1:A:138:MET:HE2	1:A:143:ASP:HB2	11	0.05
(1,2313)	1:A:138:MET:HE3	1:A:143:ASP:HB2	11	0.05
(1,2263)	1:A:133:LEU:HD11	1:A:136:LEU:HD21	19	0.05
(1,2263)	1:A:133:LEU:HD11	1:A:136:LEU:HD22	19	0.05
(1,2263)	1:A:133:LEU:HD11	1:A:136:LEU:HD23	19	0.05
(1,2263)	1:A:133:LEU:HD12	1:A:136:LEU:HD21	19	0.05
(1,2263)	1:A:133:LEU:HD12	1:A:136:LEU:HD22	19	0.05
(1,2263)	1:A:133:LEU:HD12	1:A:136:LEU:HD23	19	0.05
(1,2263)	1:A:133:LEU:HD13	1:A:136:LEU:HD21	19	0.05
(1,2263)	1:A:133:LEU:HD13	1:A:136:LEU:HD22	19	0.05
(1,2263)	1:A:133:LEU:HD13	1:A:136:LEU:HD23	19	0.05
(1,2191)	1:A:127:VAL:HG21	1:A:174:TRP:H	2	0.05
(1,2191)	1:A:127:VAL:HG22	1:A:174:TRP:H	2	0.05
(1,2191)	1:A:127:VAL:HG23	1:A:174:TRP:H	2	0.05
(1,21)	1:A:25:ILE:H	1:A:10:ALA:O	9	0.05
(1,2053)	1:A:120:GLN:HG2	1:A:120:GLN:HE21	17	0.05
(1,2053)	1:A:120:GLN:HG2	1:A:120:GLN:HE21	19	0.05
(1,2034)	1:A:119:GLU:HG2	1:A:122:LEU:HD11	15	0.05
(1,2034)	1:A:119:GLU:HG2	1:A:122:LEU:HD12	15	0.05
(1,2034)	1:A:119:GLU:HG2	1:A:122:LEU:HD13	15	0.05
(1,2016)	1:A:118:SER:H	1:A:121:MET:HB2	20	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1999)	1:A:116:THR:HG21	1:A:121:MET:HB2	4	0.05
(1,1999)	1:A:116:THR:HG22	1:A:121:MET:HB2	4	0.05
(1,1999)	1:A:116:THR:HG23	1:A:121:MET:HB2	4	0.05
(1,1944)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:GLU:H	12	0.05
(1,1944)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:GLU:H	12	0.05
(1,1944)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:GLU:H	12	0.05
(1,189)	1:A:178:VAL:H	1:A:174:TRP:O	1	0.05
(1,1859)	1:A:104:GLU:HA	1:A:107:GLY:H	19	0.05
(1,185)	1:A:176:ALA:H	1:A:172:GLU:O	13	0.05
(1,180)	1:A:173:ALA:N	1:A:169:GLU:O	1	0.05
(1,180)	1:A:173:ALA:N	1:A:169:GLU:O	10	0.05
(1,1780)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:100:ARG:H	19	0.05
(1,1780)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:100:ARG:H	19	0.05
(1,1780)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:100:ARG:H	19	0.05
(1,1765)	1:A:98:GLU:HG2	1:A:99:LEU:H	16	0.05
(1,176)	1:A:171:GLY:N	1:A:167:SER:O	8	0.05
(1,175)	1:A:171:GLY:H	1:A:167:SER:O	9	0.05
(1,1731)	1:A:96:GLU:H	1:A:114:HIS:HD2	17	0.05
(1,1706)	1:A:92:LYS:H	1:A:92:LYS:HD2	2	0.05
(1,1703)	1:A:90:GLU:HG2	1:A:91:GLY:H	6	0.05
(1,164)	1:A:165:ARG:N	1:A:161:PRO:O	1	0.05
(1,1621)	1:A:85:ILE:HD11	1:A:99:LEU:HB2	8	0.05
(1,1621)	1:A:85:ILE:HD12	1:A:99:LEU:HB2	8	0.05
(1,1621)	1:A:85:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HB2	8	0.05
(1,16)	1:A:22:ARG:N	1:A:116:THR:O	3	0.05
(1,16)	1:A:22:ARG:N	1:A:116:THR:O	5	0.05
(1,1594)	1:A:84:THR:HA	1:A:98:GLU:HB2	7	0.05
(1,159)	1:A:141:ARG:H	1:A:137:GLY:O	18	0.05
(1,1583)	1:A:83:LEU:HD11	1:A:84:THR:H	10	0.05
(1,1583)	1:A:83:LEU:HD12	1:A:84:THR:H	10	0.05
(1,1583)	1:A:83:LEU:HD13	1:A:84:THR:H	10	0.05
(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD11	5	0.05
(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD12	5	0.05
(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD13	5	0.05
(1,1570)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:83:LEU:H	12	0.05
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	15	0.05
(1,1467)	1:A:74:ILE:H	1:A:74:ILE:HG12	14	0.05
(1,145)	1:A:134:ASP:H	1:A:130:GLU:O	10	0.05
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB1	1:A:89:TYR:HD1	1	0.05
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB2	1:A:89:TYR:HD1	1	0.05
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB3	1:A:89:TYR:HD1	1	0.05
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB1	1:A:89:TYR:HD1	20	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB2	1:A:89:TYR:HD1	20	0.05
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB3	1:A:89:TYR:HD1	20	0.05
(1,1415)	1:A:68:GLY:H	1:A:69:ASN:H	2	0.05
(1,1415)	1:A:68:GLY:H	1:A:69:ASN:H	10	0.05
(1,141)	1:A:132:ALA:H	1:A:128:GLY:O	1	0.05
(1,1408)	1:A:67:GLN:HA	1:A:69:ASN:H	18	0.05
(1,1407)	1:A:67:GLN:HA	1:A:68:GLY:H	2	0.05
(1,1407)	1:A:67:GLN:HA	1:A:68:GLY:H	14	0.05
(1,1392)	1:A:66:LEU:HA	1:A:67:GLN:H	2	0.05
(1,138)	1:A:130:GLU:N	1:A:126:GLY:O	18	0.05
(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	19	0.05
(1,1342)	1:A:63:ASN:HA	1:A:73:ASP:HA	2	0.05
(1,1342)	1:A:63:ASN:HA	1:A:73:ASP:HA	19	0.05
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD11	12	0.05
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD12	12	0.05
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD13	12	0.05
(1,13)	1:A:21:ALA:H	1:A:14:ARG:O	20	0.05
(1,1275)	1:A:55:LYS:HG2	1:A:56:GLY:H	14	0.05
(1,1255)	1:A:54:PRO:HB2	1:A:64:PHE:HB2	16	0.05
(1,124)	1:A:123:VAL:N	1:A:119:GLU:O	14	0.05
(1,1231)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:55:LYS:H	13	0.05
(1,1231)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:55:LYS:H	13	0.05
(1,1231)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:55:LYS:H	13	0.05
(1,1230)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:53:GLU:H	3	0.05
(1,1230)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:53:GLU:H	3	0.05
(1,1230)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:53:GLU:H	3	0.05
(1,1221)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:69:ASN:H	7	0.05
(1,1221)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:69:ASN:H	7	0.05
(1,1221)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:69:ASN:H	7	0.05
(1,1202)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:129:TRP:HH2	11	0.05
(1,1198)	1:A:51:PHE:HD1	1:A:52:ILE:HD11	11	0.05
(1,1198)	1:A:51:PHE:HD1	1:A:52:ILE:HD12	11	0.05
(1,1198)	1:A:51:PHE:HD1	1:A:52:ILE:HD13	11	0.05
(1,1198)	1:A:51:PHE:HD2	1:A:52:ILE:HD11	11	0.05
(1,1198)	1:A:51:PHE:HD2	1:A:52:ILE:HD12	11	0.05
(1,1198)	1:A:51:PHE:HD2	1:A:52:ILE:HD13	11	0.05
(1,115)	1:A:114:HIS:H	1:A:24:ILE:O	9	0.05
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD11	1	0.05
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD12	1	0.05
(1,1066)	1:A:42:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD13	1	0.05
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD11	1	0.05
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD12	1	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1066)	1:A:42:THR:HG22	1:A:99:LEU:HD13	1	0.05
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD11	1	0.05
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD12	1	0.05
(1,1066)	1:A:42:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD13	1	0.05
(1,1037)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:136:LEU:HD11	10	0.05
(1,1037)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:136:LEU:HD12	10	0.05
(1,1037)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:136:LEU:HD13	10	0.05
(1,1037)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:136:LEU:HD11	10	0.05
(1,1037)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:136:LEU:HD12	10	0.05
(1,1037)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:136:LEU:HD13	10	0.05
(1,1037)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:136:LEU:HD11	10	0.05
(1,1037)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:136:LEU:HD12	10	0.05
(1,1037)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:136:LEU:HD13	10	0.05
(1,1034)	1:A:40:ALA:HA	1:A:46:ARG:HD2	12	0.05
(1,1033)	1:A:40:ALA:HA	1:A:46:ARG:HB3	2	0.05
(1,101)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:O	20	0.05
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD11	15	0.05
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD12	15	0.05
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD13	15	0.05
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD11	20	0.05
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD12	20	0.05
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD13	20	0.05
(1,99)	1:A:101:LEU:H	1:A:81:ARG:O	2	0.04
(1,968)	1:A:37:VAL:HG21	1:A:108:THR:HA	2	0.04
(1,968)	1:A:37:VAL:HG22	1:A:108:THR:HA	2	0.04
(1,968)	1:A:37:VAL:HG23	1:A:108:THR:HA	2	0.04
(1,968)	1:A:37:VAL:HG21	1:A:108:THR:HA	12	0.04
(1,968)	1:A:37:VAL:HG22	1:A:108:THR:HA	12	0.04
(1,968)	1:A:37:VAL:HG23	1:A:108:THR:HA	12	0.04
(1,967)	1:A:37:VAL:HG21	1:A:108:THR:H	4	0.04
(1,967)	1:A:37:VAL:HG22	1:A:108:THR:H	4	0.04
(1,967)	1:A:37:VAL:HG23	1:A:108:THR:H	4	0.04
(1,95)	1:A:99:LEU:H	1:A:83:LEU:O	2	0.04
(1,91)	1:A:97:VAL:H	1:A:85:ILE:O	10	0.04
(1,904)	1:A:34:VAL:HG21	1:A:101:LEU:H	14	0.04
(1,904)	1:A:34:VAL:HG22	1:A:101:LEU:H	14	0.04
(1,904)	1:A:34:VAL:HG23	1:A:101:LEU:H	14	0.04
(1,901)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:39:SER:H	11	0.04
(1,901)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:39:SER:H	11	0.04
(1,901)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:39:SER:H	11	0.04
(1,897)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:37:VAL:H	7	0.04
(1,897)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:37:VAL:H	7	0.04



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

(1,897)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:37:VAL:H         7         0.04           (1,893)         1:A:34:VAL:HG11         1:A:35:ASP:H         9         0.04           (1,893)         1:A:34:VAL:HG12         1:A:35:ASP:H         9         0.04           (1,893)         1:A:34:VAL:HG13         1:A:35:ASP:H         9         0.04           (1,869)         1:A:34:VAL:H         1:A:103:GLU:HG3         14         0.04           (1,867)         1:A:34:VAL:H         1:A:103:GLU:HA         9         0.04           (1,867)         1:A:34:VAL:H         1:A:103:GLU:HA         15         0.04           (1,867)         1:A:34:VAL:H         1:A:103:GLU:HA         16         0.04           (1,867)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:33:PRO:HD3         2         0.04           (1,845)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:33:PRO:HD3         2         0.04           (1,845)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:33:PRO:HD3         6         0.04           (1,845)         1:A:33:ASP:HA         1:A:107:GLY:H         13         0.04           (1,845)         1:A:31:ASP:HB         1:A:107:GLY:H         13         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:HB         1:A:107:GLY:H         13	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,893) 1:A:34:VAL:HG12 1:A:35:ASP:H 9 0.04 (1,893) 1:A:34:VAL:HG13 1:A:35:ASP:H 9 0.04 (1,869) 1:A:34:VAL:H 1:A:103:GLU:HG3 14 0.04 (1,867) 1:A:34:VAL:H 1:A:103:GLU:HA 15 0.04 (1,867) 1:A:34:VAL:H 1:A:103:GLU:HA 15 0.04 (1,867) 1:A:34:VAL:H 1:A:103:GLU:HA 15 0.04 (1,867) 1:A:34:VAL:H 1:A:103:GLU:HA 16 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB1 1:A:33:PRO:HD3 2 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB2 1:A:33:PRO:HD3 2 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB3 1:A:33:PRO:HD3 2 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB3 1:A:33:PRO:HD3 2 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB3 1:A:33:PRO:HD3 6 0.04 (1,825) 1:A:31:ASP:HA 1:A:107:GLY:H 13 0.04 (1,821) 1:A:31:ASP:HA 1:A:107:GLY:H 13 0.04 (1,821) 1:A:31:ASP:H 1:A:140:ILE:HG21 7 0.04 (1,821) 1:A:31:ASP:H 1:A:140:ILE:HG21 7 0.04 (1,821) 1:A:31:ASP:H 1:A:140:ILE:HG22 7 0.04 (1,821) 1:A:31:ASP:H 1:A:140:ILE:HG21 7 0.04 (1,803) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:110:LEU:HD11 4 0.04 (1,803) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:110:LEU:HD11 4 0.04 (1,803) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:110:LEU:HD12 4 0.04 (1,769) 1:A:29:ARG:HE 1:A:109:LEU:HD12 16 0.04 (1,769) 1:A:29:ARG:HE 1:A:109:LEU:HD22 16 0.04 (1,753) 1:A:29:ARG:HE 1:A:109:LEU:HD23 16 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD22 2 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD22 2 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD22 5 0.04 (1,742) 1:A:28	(1,897)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:37:VAL:H	7	0.04
(1,893) 1:A:34:VAL:HG13 1:A:35:ASP:H 9 0.04 (1,869) 1:A:34:VAL:H 1:A:103:GLU:HG3 14 0.04 (1,867) 1:A:34:VAL:H 1:A:103:GLU:HA 9 0.04 (1,867) 1:A:34:VAL:H 1:A:103:GLU:HA 15 0.04 (1,867) 1:A:34:VAL:H 1:A:103:GLU:HA 16 0.04 (1,867) 1:A:34:VAL:H 1:A:103:GLU:HA 16 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB1 1:A:33:PRO:HD3 2 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB2 1:A:33:PRO:HD3 2 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB3 1:A:33:PRO:HD3 2 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB3 1:A:33:PRO:HD3 2 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB1 1:A:33:PRO:HD3 6 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB1 1:A:33:PRO:HD3 6 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB2 1:A:33:PRO:HD3 6 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB2 1:A:33:PRO:HD3 6 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB2 1:A:33:PRO:HD3 6 0.04 (1,845) 1:A:31:ASP:HA 1:A:107:GLY:H 13 0.04 (1,821) 1:A:31:ASP:H 1:A:140:ILE:HG21 7 0.04 (1,821) 1:A:31:ASP:H 1:A:140:ILE:HG21 7 0.04 (1,821) 1:A:31:ASP:H 1:A:140:ILE:HG22 7 0.04 (1,821) 1:A:31:ASP:H 1:A:140:ILE:HG22 7 0.04 (1,803) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:110:LEU:HD11 4 0.04 (1,803) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:110:LEU:HD11 4 0.04 (1,803) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:110:LEU:HD11 4 0.04 (1,769) 1:A:29:ARG:HE 1:A:109:LEU:HD2 16 0.04 (1,769) 1:A:29:ARG:HE 1:A:109:LEU:HD2 16 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD22 2 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD22 5 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD22 5 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD22 5 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD21 5 0.04 (1,754) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD22 5 0.04 (1,754) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD23 5 0.04 (1,742) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD23 5 0.04 (1,742) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD22 5 0.04 (1,742) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD23 5 0.04 (1,742) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD23 5 0.04 (1,742) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD23 5 0.04 (1,742)	(1,893)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:H	9	0.04
(1,869) 1:A:34:VAL:H 1:A:103:GLU:HG3 14 0.04 (1,867) 1:A:34:VAL:H 1:A:103:GLU:HA 9 0.04 (1,867) 1:A:34:VAL:H 1:A:103:GLU:HA 15 0.04 (1,867) 1:A:34:VAL:H 1:A:103:GLU:HA 16 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB1 1:A:33:PRO:HD3 2 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB2 1:A:33:PRO:HD3 6 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB2 1:A:33:PRO:HD3 6 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB3 1:A:33:PRO:HD3 6 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB3 1:A:33:PRO:HD3 6 0.04 (1,825) 1:A:31:ASP:HA 1:A:107:GLY:H 13 0.04 (1,825) 1:A:31:ASP:HA 1:A:107:GLY:H 13 0.04 (1,821) 1:A:31:ASP:H 1:A:140:ILE:HG21 7 0.04 (1,821) 1:A:31:ASP:H 1:A:140:ILE:HG22 7 0.04 (1,821) 1:A:31:ASP:H 1:A:140:ILE:HG22 7 0.04 (1,821) 1:A:31:ASP:H 1:A:140:ILE:HG23 7 0.04 (1,803) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:110:LEU:HD11 4 0.04 (1,803) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:110:LEU:HD11 4 0.04 (1,803) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:110:LEU:HD12 4 0.04 (1,803) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:110:LEU:HD12 1 6 0.04 (1,769) 1:A:29:ARG:HE 1:A:109:LEU:HD21 16 0.04 (1,759) 1:A:29:ARG:HE 1:A:109:LEU:HD22 16 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD22 2 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD22 2 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD23 5 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD22 5 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD23 5 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD23 5 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD22 5 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD23 5 0.04 (1,754) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD23 5 0.04 (1,754) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD23 5 0.04 (1,754) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD23 5 0.04 (1,742) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD23 5 0.04 (	(1,893)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:H	9	0.04
(1,867) 1:A:34:VAL:H 1:A:103:GLU:HA 9 0.04 (1,867) 1:A:34:VAL:H 1:A:103:GLU:HA 15 0.04 (1,867) 1:A:34:VAL:H 1:A:103:GLU:HA 15 0.04 (1,867) 1:A:34:VAL:H 1:A:103:GLU:HA 16 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB1 1:A:33:PRO:HD3 2 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB2 1:A:33:PRO:HD3 2 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB2 1:A:33:PRO:HD3 2 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB3 1:A:33:PRO:HD3 2 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB1 1:A:33:PRO:HD3 6 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB2 1:A:33:PRO:HD3 6 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB2 1:A:33:PRO:HD3 6 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB2 1:A:33:PRO:HD3 6 0.04 (1,825) 1:A:31:ASP:HA 1:A:107:GLY:H 13 0.04 (1,821) 1:A:31:ASP:HA 1:A:107:GLY:H 13 0.04 (1,821) 1:A:31:ASP:H 1:A:140:ILE:HG21 7 0.04 (1,821) 1:A:31:ASP:H 1:A:140:ILE:HG21 7 0.04 (1,821) 1:A:31:ASP:H 1:A:140:ILE:HG22 7 0.04 (1,811) 1:A:31:ASP:H 1:A:140:ILE:HG22 7 0.04 (1,803) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:110:LEU:HD11 4 0.04 (1,803) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:110:LEU:HD11 4 0.04 (1,803) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:110:LEU:HD12 4 0.04 (1,803) 1:A:30:TYR:HD1 1:A:110:LEU:HD12 4 0.04 (1,769) 1:A:29:ARG:HE 1:A:109:LEU:HD21 16 0.04 (1,769) 1:A:29:ARG:HE 1:A:109:LEU:HD21 16 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD22 2 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD21 2 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD21 5 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD21 5 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD22 5 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD21 5 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD21 5 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD22 5 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD22 5 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD21 5 0.04 (1,754) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD21 5 0.04 (1,754) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD22 5 0.04 (1,754) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD21 5 0.04 (1,754) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD22 5 0.04 (1,754) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD21 5 0.04 (1,754) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD21 5 0.04 (1,742) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD21 5 0.04 (1,742) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD22 5 0.04 (1,742) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD22 5 0.04 (1,742) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD23 5 0.04 (	(1,893)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:H	9	0.04
(1,867)         1:A:34:VAL:H         1:A:103:GLU:HA         15         0.04           (1,867)         1:A:34:VAL:H         1:A:103:GLU:HA         16         0.04           (1,845)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:33:PRO:HD3         2         0.04           (1,845)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:33:PRO:HD3         2         0.04           (1,845)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:33:PRO:HD3         6         0.04           (1,845)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:33:PRO:HD3         6         0.04           (1,845)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:33:PRO:HD3         6         0.04           (1,845)         1:A:31:ASP:HA         1:A:107:GLY:H         13         0.04           (1,845)         1:A:31:ASP:HA         1:A:140:ILE:HG21         7         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG22         7         0.04           (1,831)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:140:ILE:HG23         <	(1,869)	1:A:34:VAL:H	1:A:103:GLU:HG3	14	0.04
(1,867) 1:A:34:VAL:H 1:A:103:GLU:HA 16 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB1 1:A:33:PRO:HD3 2 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB2 1:A:33:PRO:HD3 2 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB2 1:A:33:PRO:HD3 2 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB3 1:A:33:PRO:HD3 2 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB1 1:A:33:PRO:HD3 6 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB1 1:A:33:PRO:HD3 6 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB2 1:A:33:PRO:HD3 6 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB3 1:A:33:PRO:HD3 6 0.04 (1,845) 1:A:32:ALA:HB3 1:A:33:PRO:HD3 6 0.04 (1,845) 1:A:31:ASP:HA 1:A:107:GLY:H 13 0.04 (1,825) 1:A:31:ASP:HA 1:A:107:GLY:H 13 0.04 (1,821) 1:A:31:ASP:H 1:A:140:ILE:HG21 7 0.04 (1,821) 1:A:31:ASP:H 1:A:140:ILE:HG22 7 0.04 (1,821) 1:A:31:ASP:H 1:A:140:ILE:HG22 7 0.04 (1,821) 1:A:31:ASP:H 1:A:140:ILE:HG23 7 0.04 (1,818) 1:A:30:TYR:HB1 1:A:10:ILE:HD11 4 0.04 (1,803) 1:A:30:TYR:HB1 1:A:10:ILE:HD11 4 0.04 (1,803) 1:A:30:TYR:HB1 1:A:10:ILE:HD12 4 0.04 (1,803) 1:A:30:TYR:HB1 1:A:10:ILE:HD12 4 0.04 (1,769) 1:A:29:ARG:HE 1:A:109:LEU:HD13 4 0.04 (1,769) 1:A:29:ARG:HE 1:A:109:LEU:HD13 16 0.04 (1,769) 1:A:29:ARG:HE 1:A:109:LEU:HD21 16 0.04 (1,769) 1:A:29:ARG:HE 1:A:109:LEU:HD22 16 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD21 2 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD21 2 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD21 2 0.04 (1,753) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD23 5 0.04 (1,754) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD23 5 0.04 (1,754) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD23 5 0.04 (1,754) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD23 5 0.04 (1,742) 1:A:28:GLN:HE21 1:A:133:LEU:HD23 5 0.0	(1,867)	1:A:34:VAL:H	1:A:103:GLU:HA	9	0.04
(1,845)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:33:PRO:HD3         2         0.04           (1,845)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:33:PRO:HD3         2         0.04           (1,845)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:33:PRO:HD3         2         0.04           (1,845)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:33:PRO:HD3         6         0.04           (1,845)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:33:PRO:HD3         6         0.04           (1,845)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:33:PRO:HD3         6         0.04           (1,845)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:33:PRO:HD3         6         0.04           (1,845)         1:A:31:ASP:H         1:A:107:GIY:H         13         0.04           (1,825)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG21         7         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG21         7         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG22         7         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILEU:HG23         7         0.04           (1,821)         1:A:33:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD11         4         0.04           (1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD12	(1,867)	1:A:34:VAL:H	1:A:103:GLU:HA	15	0.04
(1,845)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:33:PRO:HD3         2         0.04           (1,845)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:33:PRO:HD3         2         0.04           (1,845)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:33:PRO:HD3         6         0.04           (1,845)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:33:PRO:HD3         6         0.04           (1,845)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:33:PRO:HD3         6         0.04           (1,845)         1:A:31:ASP:HA         1:A:107:GLY:H         13         0.04           (1,845)         1:A:31:ASP:HA         1:A:140:ILE:HG21         7         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG21         7         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG22         7         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG23         7         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:HB1         1:A:140:ILE:HG23         7         0.04           (1,831)         1:A:30:TYR:HB1         1:A:110:LEU:HD11         4         0.04           (1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD12         4         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD21	(1,867)	1:A:34:VAL:H	1:A:103:GLU:HA	16	0.04
(1,845)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:33:PRO:HD3         2         0.04           (1,845)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:33:PRO:HD3         6         0.04           (1,845)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:33:PRO:HD3         6         0.04           (1,845)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:33:PRO:HD3         6         0.04           (1,845)         1:A:31:ASP:HA         1:A:107:GLY:H         13         0.04           (1,825)         1:A:31:ASP:HA         1:A:140:ILE:HG21         7         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG22         7         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG23         7         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG23         7         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG23         7         0.04           (1,881)         1:A:30:TYR:HB1         1:A:110:ILEU:HD23         4         0.04           (1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD11         4         0.04           (1,803)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD21         16         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD21	(1,845)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:33:PRO:HD3	2	0.04
(1,845)         1:A:32:ALA:HB1         1:A:33:PRO:HD3         6         0.04           (1,845)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:33:PRO:HD3         6         0.04           (1,845)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:33:PRO:HD3         6         0.04           (1,825)         1:A:31:ASP:HA         1:A:107:GLY:H         13         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG21         7         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG22         7         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG23         7         0.04           (1,821)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:137:GLY:HA2         4         0.04           (1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD11         4         0.04           (1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD12         4         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD21	(1,845)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:33:PRO:HD3		0.04
(1,845)         1:A:32:ALA:HB2         1:A:33:PRO:HD3         6         0.04           (1,845)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:33:PRO:HD3         6         0.04           (1,825)         1:A:31:ASP:HA         1:A:107:GLY:H         13         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG21         7         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG22         7         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG23         7         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG23         7         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG23         7         0.04           (1,821)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:130:ILE:HD22         4         0.04           (1,883)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD11         4         0.04           (1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD12         4         0.04           (1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD13         4         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD21         16         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD23	(1,845)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:33:PRO:HD3	2	0.04
(1,845)         1:A:32:ALA:HB3         1:A:33:PRO:HD3         6         0.04           (1,825)         1:A:31:ASP:HA         1:A:107:GLY:H         13         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG21         7         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG22         7         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG23         7         0.04           (1,881)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:137:GLY:HA2         4         0.04           (1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD11         4         0.04           (1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD12         4         0.04           (1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD13         4         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD21         16         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD22         16         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:H         1:A:29:ARG:HD2         16         0.04           (1,756)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD22	(1,845)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:33:PRO:HD3	6	0.04
(1,825)         1:A:31:ASP:HA         1:A:107:GLY:H         13         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG21         7         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG22         7         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG23         7         0.04           (1,888)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:137:GLY:HA2         4         0.04           (1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD11         4         0.04           (1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD12         4         0.04           (1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD13         4         0.04           (1,803)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD21         16         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD22         16         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD23         16         0.04           (1,756)         1:A:29:GRG:H         1:A:29:GRG:HD2         16         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD22         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD	(1,845)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:33:PRO:HD3	6	0.04
(1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG21         7         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG22         7         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG23         7         0.04           (1,818)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:137:GLY:HA2         4         0.04           (1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD11         4         0.04           (1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD13         4         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD21         16         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD22         16         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD23         16         0.04           (1,750)         1:A:29:ARG:H         1:A:133:LEU:HD23         16         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133	(1,845)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:33:PRO:HD3	6	0.04
(1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG22         7         0.04           (1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG23         7         0.04           (1,818)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:137:GLY:HA2         4         0.04           (1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD11         4         0.04           (1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD13         4         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD21         16         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD22         16         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD23         16         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD23         16         0.04           (1,750)         1:A:29:ARG:HE         1:A:133:LEU:HD21         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:1	(1,825)	1:A:31:ASP:HA	1:A:107:GLY:H	13	0.04
(1,821)         1:A:31:ASP:H         1:A:140:ILE:HG23         7         0.04           (1,818)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:137:GLY:HA2         4         0.04           (1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD11         4         0.04           (1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD12         4         0.04           (1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD13         4         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD21         16         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD22         16         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD23         16         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:29:ARG:HD2         16         0.04           (1,750)         1:A:29:ARG:H         1:A:29:ARG:HD2         16         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133	(1,821)	1:A:31:ASP:H	1:A:140:ILE:HG21	7	0.04
(1,818)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:137:GLY:HA2         4         0.04           (1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD11         4         0.04           (1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD12         4         0.04           (1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD13         4         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD21         16         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD22         16         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD23         16         0.04           (1,750)         1:A:29:ARG:HE         1:A:130:LEU:HD23         16         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD22         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21 <t< td=""><td>(1,821)</td><td>1:A:31:ASP:H</td><td>1:A:140:ILE:HG22</td><td>7</td><td>0.04</td></t<>	(1,821)	1:A:31:ASP:H	1:A:140:ILE:HG22	7	0.04
(1,818)         1:A:30:TYR:HE1         1:A:137:GLY:HA2         4         0.04           (1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD11         4         0.04           (1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD12         4         0.04           (1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD13         4         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD21         16         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD22         16         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD23         16         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD23         16         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD23         16         0.04           (1,750)         1:A:29:ARG:H         1:A:133:LEU:HD21         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD22         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD22         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:	( '	1:A:31:ASP:H	1:A:140:ILE:HG23	7	0.04
(1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD11         4         0.04           (1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD12         4         0.04           (1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD13         4         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD21         16         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD23         16         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD23         16         0.04           (1,756)         1:A:29:ARG:H         1:A:29:ARG:HD2         16         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD22         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD22         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD22         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21 <td< td=""><td></td><td>1:A:30:TYR:HE1</td><td>1:A:137:GLY:HA2</td><td>4</td><td>0.04</td></td<>		1:A:30:TYR:HE1	1:A:137:GLY:HA2	4	0.04
(1,803)         1:A:30:TYR:HD1         1:A:110:LEU:HD13         4         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD21         16         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD22         16         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD23         16         0.04           (1,756)         1:A:29:ARG:H         1:A:29:ARG:HD2         16         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD22         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD22         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD22         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         2         0.04           (1,754)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         2         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         <	(1,803)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HD11	4	0.04
(1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD21         16         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD22         16         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD23         16         0.04           (1,756)         1:A:29:ARG:H         1:A:29:ARG:HD2         16         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD22         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD22         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         2         0.04           (1,754)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD22         2         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         2         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21	(1,803)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HD12	4	0.04
(1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD22         16         0.04           (1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD23         16         0.04           (1,756)         1:A:29:ARG:H         1:A:29:ARG:HD2         16         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD22         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD22         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         2         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         2         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         2         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         5         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21	(1,803)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HD13	4	0.04
(1,769)         1:A:29:ARG:HE         1:A:109:LEU:HD23         16         0.04           (1,756)         1:A:29:ARG:H         1:A:29:ARG:HD2         16         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD22         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD22         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         5         0.04           (1,754)         1:A:82:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         2         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         2         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         2         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         5         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21	(1,769)	1:A:29:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD21	16	0.04
(1,756)         1:A:29:ARG:H         1:A:29:ARG:HD2         16         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD22         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:78:GLU:O         3         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         5         0.04           (1,754)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         2         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         2         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         5         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         5         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         5         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         <	(1,769)	1:A:29:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD22	16	0.04
(1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD22         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD22         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         5         0.04           (1,754)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         2         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         2         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         5         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD22         5         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         5         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         5         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21	(1,769)	1:A:29:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD23	16	0.04
(1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD22         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD22         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:78:GLU:O         3         0.04           (1,75)         1:A:82:ARG:H         1:A:78:GLU:O         3         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         2         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         2         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         5         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD22         5         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         5         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         5         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         1	(1,756)	1:A:29:ARG:H	1:A:29:ARG:HD2	16	0.04
(1,753)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD23       2       0.04         (1,753)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD21       5       0.04         (1,753)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD22       5       0.04         (1,753)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD23       5       0.04         (1,75)       1:A:82:ARG:H       1:A:78:GLU:O       3       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD21       2       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD22       2       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD23       2       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD22       5       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD22       5       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD23       5       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD23       5       0.04         (1,734)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:109:LEU:HG       1       0.04	(1,753)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD21	2	0.04
(1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         2         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD22         5         0.04           (1,753)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         5         0.04           (1,75)         1:A:82:ARG:H         1:A:78:GLU:O         3         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         2         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD22         2         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD21         5         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD22         5         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         5         0.04           (1,742)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:133:LEU:HD23         5         0.04           (1,734)         1:A:28:GLN:HE21         1:A:109:LEU:HG         1         0.04	(1,753)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD22	2	0.04
(1,753)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD21       5       0.04         (1,753)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD22       5       0.04         (1,753)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD23       5       0.04         (1,75)       1:A:82:ARG:H       1:A:78:GLU:O       3       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD21       2       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD22       2       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD21       5       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD22       5       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD23       5       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD23       5       0.04         (1,734)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:109:LEU:HG       1       0.04		1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD23	2	0.04
(1,753)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD23       5       0.04         (1,75)       1:A:82:ARG:H       1:A:78:GLU:O       3       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD21       2       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD22       2       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD23       2       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD21       5       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD22       5       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD23       5       0.04         (1,734)       1:A:28:GLN:H       1:A:109:LEU:HG       1       0.04	(1,753)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD21	5	0.04
(1,75)       1:A:82:ARG:H       1:A:78:GLU:O       3       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD21       2       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD22       2       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD23       2       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD21       5       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD22       5       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD23       5       0.04         (1,734)       1:A:28:GLN:H       1:A:109:LEU:HG       1       0.04	(1,753)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD22	5	0.04
(1,75)       1:A:82:ARG:H       1:A:78:GLU:O       3       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD21       2       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD22       2       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD23       2       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD21       5       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD22       5       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD23       5       0.04         (1,734)       1:A:28:GLN:H       1:A:109:LEU:HG       1       0.04	(1,753)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD23	5	0.04
(1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD21       2       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD22       2       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD23       2       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD21       5       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD22       5       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD23       5       0.04         (1,734)       1:A:28:GLN:H       1:A:109:LEU:HG       1       0.04		1:A:82:ARG:H	1:A:78:GLU:O	3	0.04
(1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD22       2       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD23       2       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD21       5       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD22       5       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD23       5       0.04         (1,734)       1:A:28:GLN:H       1:A:109:LEU:HG       1       0.04		1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD21	2	0.04
(1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD23       2       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD21       5       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD22       5       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD23       5       0.04         (1,734)       1:A:28:GLN:H       1:A:109:LEU:HG       1       0.04		1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD22	2	0.04
(1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD21       5       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD22       5       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD23       5       0.04         (1,734)       1:A:28:GLN:H       1:A:109:LEU:HG       1       0.04	(1,742)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD23	2	0.04
(1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD22       5       0.04         (1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD23       5       0.04         (1,734)       1:A:28:GLN:H       1:A:109:LEU:HG       1       0.04	· · /	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD21	5	0.04
(1,742)       1:A:28:GLN:HE21       1:A:133:LEU:HD23       5       0.04         (1,734)       1:A:28:GLN:H       1:A:109:LEU:HG       1       0.04	, ,	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD22	5	0.04
(1,734) 1:A:28:GLN:H 1:A:109:LEU:HG 1 0.04	, , ,	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD23	5	0.04
		1:A:28:GLN:H	1:A:109:LEU:HG	1	0.04
(1,i20)   1:A:2i:AKG:HG3   1:A:28:GLN:H   9   0.04	(1,726)	1:A:27:ARG:HG3	1:A:28:GLN:H	9	0.04
(1,726) 1:A:27:ARG:HG3 1:A:28:GLN:H 19 0.04		1:A:27:ARG:HG3	1:A:28:GLN:H	19	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,719)	1:A:27:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD21	13	0.04
(1,719)	1:A:27:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD22	13	0.04
(1,719)	1:A:27:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD23	13	0.04
(1,715)	1:A:27:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD11	11	0.04
(1,715)	1:A:27:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD12	11	0.04
(1,715)	1:A:27:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD13	11	0.04
(1,689)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:28:GLN:HE22	5	0.04
(1,689)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:28:GLN:HE22	5	0.04
(1,689)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:28:GLN:HE22	5	0.04
(1,688)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:28:GLN:HE21	13	0.04
(1,688)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:28:GLN:HE21	13	0.04
(1,688)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:28:GLN:HE21	13	0.04
(1,61)	1:A:64:PHE:H	1:A:72:GLY:O	9	0.04
(1,580)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:125:VAL:HG21	12	0.04
(1,580)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:125:VAL:HG22	12	0.04
(1,580)	1:A:24:ILE:HG12	1:A:125:VAL:HG23	12	0.04
(1,57)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:O	9	0.04
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG21	13	0.04
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG22	13	0.04
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG23	13	0.04
(1,485)	1:A:18:ALA:HB1	1:A:117:THR:HG21	15	0.04
(1,485)	1:A:18:ALA:HB1	1:A:117:THR:HG22	15	0.04
(1,485)	1:A:18:ALA:HB1	1:A:117:THR:HG23	15	0.04
(1,485)	1:A:18:ALA:HB2	1:A:117:THR:HG21	15	0.04
(1,485)	1:A:18:ALA:HB2	1:A:117:THR:HG22	15	0.04
(1,485)	1:A:18:ALA:HB2	1:A:117:THR:HG23	15	0.04
(1,485)	1:A:18:ALA:HB3	1:A:117:THR:HG21	15	0.04
(1,485)	1:A:18:ALA:HB3	1:A:117:THR:HG22	15	0.04
(1,485)	1:A:18:ALA:HB3	1:A:117:THR:HG23	15	0.04
(1,458)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:18:ALA:H	7	0.04
(1,446)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HG21	4	0.04
(1,446)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HG22	4	0.04
(1,446)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HG23	4	0.04
(1,446)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HG21	4	0.04
(1,446)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HG22	4	0.04
(1,446)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HG23	4	0.04
(1,446)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HG21	4	0.04
(1,446)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HG22	4	0.04
(1,446)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HG23	4	0.04
(1,43)	1:A:42:THR:H	1:A:38:TRP:O	9	0.04
(1,43)	1:A:42:THR:H	1:A:38:TRP:O	10	0.04
(1,399)	1:A:14:ARG:HE	1:A:15:THR:H	12	0.04
(=,000)				o.o.



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,37)	1:A:39:SER:H	1:A:35:ASP:O	13	0.04
(1,330)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:178:VAL:HG21	20	0.04
(1,330)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:178:VAL:HG22	20	0.04
(1,330)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:178:VAL:HG23	20	0.04
(1,330)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:178:VAL:HG21	20	0.04
(1,330)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:178:VAL:HG22	20	0.04
(1,330)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:178:VAL:HG23	20	0.04
(1,330)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:178:VAL:HG21	20	0.04
(1,330)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:178:VAL:HG22	20	0.04
(1,330)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:178:VAL:HG23	20	0.04
(1,33)	1:A:37:VAL:H	1:A:33:PRO:O	17	0.04
(1,324)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HB2	3	0.04
(1,324)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HB2	3	0.04
(1,324)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HB2	3	0.04
(1,323)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:12:GLY:H	13	0.04
(1,323)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:12:GLY:H	13	0.04
(1,323)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:12:GLY:H	13	0.04
(1,322)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:25:ILE:HD11	13	0.04
(1,322)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:25:ILE:HD12	13	0.04
(1,322)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:25:ILE:HD13	13	0.04
(1,3)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:O	9	0.04
(1,3)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:O	13	0.04
(1,29)	1:A:29:ARG:H	1:A:6:ALA:O	9	0.04
(1,2714)	1:A:181:GLY:HA2	1:A:182:SER:H	7	0.04
(1,2710)	1:A:180:SER:H	1:A:180:SER:HB2	15	0.04
(1,2690)	1:A:178:VAL:H	1:A:179:HIS:HB2	5	0.04
(1,2664)	1:A:177:LEU:H	1:A:177:LEU:HB3	6	0.04
(1,2664)	1:A:177:LEU:H	1:A:177:LEU:HB3	20	0.04
(1,2659)	1:A:176:ALA:HA	1:A:179:HIS:HB3	10	0.04
(1,2659)	1:A:176:ALA:HA	1:A:179:HIS:HB3	11	0.04
(1,2651)	1:A:175:ALA:HB1	1:A:179:HIS:HD2	12	0.04
(1,2651)	1:A:175:ALA:HB2	1:A:179:HIS:HD2	12	0.04
(1,2651)	1:A:175:ALA:HB3	1:A:179:HIS:HD2	12	0.04
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD21	12	0.04
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD22	12	0.04
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD23	12	0.04
(1,2586)	1:A:170:ARG:HA	1:A:173:ALA:HB1	8	0.04
(1,2586)	1:A:170:ARG:HA	1:A:173:ALA:HB2	8	0.04
(1,2586)	1:A:170:ARG:HA	1:A:173:ALA:HB3	8	0.04
(1,2513)	1:A:164:MET:HE1	1:A:165:ARG:H	18	0.04
(1,2513)	1:A:164:MET:HE2	1:A:165:ARG:H	18	0.04
(1,2513)	1:A:164:MET:HE3	1:A:165:ARG:H	18	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2507)	1:A:164:MET:H	1:A:164:MET:HG2	3	0.04
(1,2492)	1:A:163:MET:H	1:A:164:MET:HG2	1	0.04
(1,2471)	1:A:160:SER:HB2	1:A:162:GLU:H	8	0.04
(1,2466)	1:A:160:SER:H	1:A:164:MET:HE1	2	0.04
(1,2466)	1:A:160:SER:H	1:A:164:MET:HE2	2	0.04
(1,2466)	1:A:160:SER:H	1:A:164:MET:HE3	2	0.04
(1,2452)	1:A:157:PHE:HA	1:A:158:GLU:H	15	0.04
(1,2452)	1:A:157:PHE:HA	1:A:158:GLU:H	19	0.04
(1,2449)	1:A:157:PHE:H	1:A:157:PHE:HB2	15	0.04
(1,2446)	1:A:156:GLU:HA	1:A:157:PHE:H	9	0.04
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB1	1:A:155:GLU:H	1	0.04
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB2	1:A:155:GLU:H	1	0.04
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB3	1:A:155:GLU:H	1	0.04
(1,2434)	1:A:154:ALA:HA	1:A:155:GLU:H	2	0.04
(1,2431)	1:A:153:ALA:HA	1:A:154:ALA:H	5	0.04
(1,2431)	1:A:153:ALA:HA	1:A:154:ALA:H	11	0.04
(1,2431)	1:A:153:ALA:HA	1:A:154:ALA:H	16	0.04
(1,2427)	1:A:152:ASP:HA	1:A:154:ALA:H	13	0.04
(1,2415)	1:A:151:GLU:H	1:A:152:ASP:H	4	0.04
(1,2410)	1:A:150:PRO:HB2	1:A:151:GLU:H	13	0.04
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:150:PRO:HD2	9	0.04
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:150:PRO:HD2	9	0.04
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:150:PRO:HD2	9	0.04
(1,2385)	1:A:146:GLY:HA2	1:A:147:GLY:H	10	0.04
(1,2385)	1:A:146:GLY:HA2	1:A:147:GLY:H	19	0.04
(1,2352)	1:A:141:ARG:H	1:A:141:ARG:HD2	4	0.04
(1,233)	1:A:8:GLU:HB2	1:A:27:ARG:HB2	12	0.04
(1,2316)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD11	2	0.04
(1,2316)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD12	2	0.04
(1,2316)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD13	2	0.04
(1,2316)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD11	2	0.04
(1,2316)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD12	2	0.04
(1,2316)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD13	2	0.04
(1,2316)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD11	2	0.04
(1,2316)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD12	2	0.04
(1,2316)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD13	2	0.04
(1,2314)	1:A:138:MET:HE1	1:A:143:ASP:HB3	17	0.04
(1,2314)	1:A:138:MET:HE2	1:A:143:ASP:HB3	17	0.04
(1,2314)	1:A:138:MET:HE3	1:A:143:ASP:HB3	17	0.04
(1,2288)	1:A:136:LEU:HD11	1:A:139:PHE:HD1	9	0.04
(1,2288)	1:A:136:LEU:HD11	1:A:139:PHE:HD2	9	0.04
(1,2288)	1:A:136:LEU:HD12	1:A:139:PHE:HD1	9	0.04



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2288)	1:A:136:LEU:HD12	1:A:139:PHE:HD2	9	0.04
(1,2288)	1:A:136:LEU:HD13	1:A:139:PHE:HD1	9	0.04
(1,2288)	1:A:136:LEU:HD13	1:A:139:PHE:HD2	9	0.04
(1,2276)	1:A:135:PHE:HE1	1:A:138:MET:HE1	11	0.04
(1,2276)	1:A:135:PHE:HE1	1:A:138:MET:HE2	11	0.04
(1,2276)	1:A:135:PHE:HE1	1:A:138:MET:HE3	11	0.04
(1,2184)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:174:TRP:HD1	1	0.04
(1,2184)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:174:TRP:HD1	1	0.04
(1,2184)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:174:TRP:HD1	1	0.04
(1,2069)	1:A:121:MET:HG2	1:A:125:VAL:HG21	16	0.04
(1,2069)	1:A:121:MET:HG2	1:A:125:VAL:HG22	16	0.04
(1,2069)	1:A:121:MET:HG2	1:A:125:VAL:HG23	16	0.04
(1,2053)	1:A:120:GLN:HG2	1:A:120:GLN:HE21	9	0.04
(1,2004)	1:A:116:THR:HG21	1:A:122:LEU:HG	16	0.04
(1,2004)	1:A:116:THR:HG22	1:A:122:LEU:HG	16	0.04
(1,2004)	1:A:116:THR:HG23	1:A:122:LEU:HG	16	0.04
(1,199)	1:A:5:GLN:HG2	1:A:5:GLN:HE21	20	0.04
(1,1950)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:114:HIS:HB3	15	0.04
(1,1950)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:114:HIS:HB3	15	0.04
(1,1950)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:114:HIS:HB3	15	0.04
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HD21	20	0.04
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HD22	20	0.04
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HD23	20	0.04
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HD21	20	0.04
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HD22	20	0.04
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HD23	20	0.04
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HD21	20	0.04
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HD22	20	0.04
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HD23	20	0.04
(1,191)	1:A:179:HIS:H	1:A:175:ALA:O	6	0.04
(1,1859)	1:A:104:GLU:HA	1:A:107:GLY:H	11	0.04
(1,1859)	1:A:104:GLU:HA	1:A:107:GLY:H	12	0.04
(1,1847)	1:A:103:GLU:HG2	1:A:104:GLU:H	4	0.04
(1,1815)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:102:SER:HB2	8	0.04
(1,1815)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:102:SER:HB2	8	0.04
(1,1815)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:102:SER:HB2	8	0.04
(1,180)	1:A:173:ALA:N	1:A:169:GLU:O	2	0.04
(1,178)	1:A:172:GLU:N	1:A:168:GLN:O	1	0.04
(1,1770)	1:A:99:LEU:HA	1:A:112:LEU:HG	4	0.04
(1,175)	1:A:171:GLY:H	1:A:167:SER:O	1	0.04
(1,1697)	1:A:90:GLU:HA	1:A:91:GLY:H	7	0.04
(1,1697)	1:A:90:GLU:HA	1:A:91:GLY:H	18	0.04



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1649)	1:A:87:TRP:HE1	1:A:89:TYR:HE1	15	0.04
(1,163)	1:A:165:ARG:H	1:A:161:PRO:O	10	0.04
(1,163)	1:A:165:ARG:H	1:A:161:PRO:O	15	0.04
(1,1610)	1:A:85:ILE:H	1:A:98:GLU:HB2	18	0.04
(1,159)	1:A:141:ARG:H	1:A:137:GLY:O	1	0.04
(1,159)	1:A:141:ARG:H	1:A:137:GLY:O	15	0.04
(1,1565)	1:A:82:ARG:HB3	1:A:99:LEU:H	17	0.04
(1,1532)	1:A:78:GLU:H	1:A:81:ARG:HB2	14	0.04
(1,1503)	1:A:75:LEU:HD11	1:A:96:GLU:HG2	5	0.04
(1,1503)	1:A:75:LEU:HD12	1:A:96:GLU:HG2	5	0.04
(1,1503)	1:A:75:LEU:HD13	1:A:96:GLU:HG2	5	0.04
(1,148)	1:A:135:PHE:N	1:A:131:MET:O	20	0.04
(1,145)	1:A:134:ASP:H	1:A:130:GLU:O	6	0.04
(1,145)	1:A:134:ASP:H	1:A:130:GLU:O	7	0.04
(1,1443)	1:A:71:SER:H	1:A:87:TRP:HA	8	0.04
(1,1412)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:67:GLN:HE21	13	0.04
(1,1407)	1:A:67:GLN:HA	1:A:68:GLY:H	9	0.04
(1,1407)	1:A:67:GLN:HA	1:A:68:GLY:H	17	0.04
(1,1405)	1:A:67:GLN:H	1:A:68:GLY:H	10	0.04
(1,1392)	1:A:66:LEU:HA	1:A:67:GLN:H	14	0.04
(1,138)	1:A:130:GLU:N	1:A:126:GLY:O	3	0.04
(1,138)	1:A:130:GLU:N	1:A:126:GLY:O	10	0.04
(1,138)	1:A:130:GLU:N	1:A:126:GLY:O	20	0.04
(1,1337)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HG21	11	0.04
(1,1337)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HG22	11	0.04
(1,1337)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HG23	11	0.04
(1,1328)	1:A:60:GLU:HG3	1:A:61:GLY:H	8	0.04
(1,1275)	1:A:55:LYS:HG2	1:A:56:GLY:H	17	0.04
(1,1260)	1:A:55:LYS:H	1:A:64:PHE:HA	19	0.04
(1,125)	1:A:124:GLU:H	1:A:120:GLN:O	5	0.04
(1,124)	1:A:123:VAL:N	1:A:119:GLU:O	6	0.04
(1,1236)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:67:GLN:H	12	0.04
(1,1236)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:67:GLN:H	12	0.04
(1,1236)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:67:GLN:H	12	0.04
(1,1225)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:69:ASN:HB2	11	0.04
(1,1225)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:69:ASN:HB2	11	0.04
(1,1225)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:69:ASN:HB2	11	0.04
(1,119)	1:A:116:THR:H	1:A:22:ARG:O	10	0.04
(1,119)	1:A:116:THR:H	1:A:22:ARG:O	15	0.04
(1,1171)	1:A:50:TRP:HE1	1:A:136:LEU:HG	3	0.04
(1,115)	1:A:114:HIS:H	1:A:24:ILE:O	10	0.04
(1,1098)	1:A:45:ASN:HA	1:A:48:ASN:HD21	1	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1096)	1:A:45:ASN:HA	1:A:48:ASN:HD21	1	0.04
(1,1069)	1:A:43:ASP:HB2	1:A:45:ASN:H	20	0.04
(1,102)	1:A:102:SER:N	1:A:109:LEU:O	6	0.04
(1,1012)	1:A:38:TRP:HZ2	1:A:79:PRO:HB2	9	0.04
(1,929)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:39:SER:H	20	0.03
(1,899)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:38:TRP:HD1	14	0.03
(1,899)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:38:TRP:HD1	14	0.03
(1,899)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:38:TRP:HD1	14	0.03
(1,893)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:H	7	0.03
(1,893)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:H	7	0.03
(1,893)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:H	7	0.03
(1,889)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HG2	3	0.03
(1,889)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HG2	3	0.03
(1,889)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HG2	3	0.03
(1,888)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HA	6	0.03
(1,888)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HA	6	0.03
(1,888)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HA	6	0.03
(1,87)	1:A:95:SER:H	1:A:87:TRP:O	9	0.03
(1,848)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:H	2	0.03
(1,848)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:H	2	0.03
(1,848)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:H	2	0.03
(1,848)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:H	20	0.03
(1,848)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:H	20	0.03
(1,848)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:H	20	0.03
(1,845)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:33:PRO:HD3	8	0.03
(1,845)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:33:PRO:HD3	8	0.03
(1,845)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:33:PRO:HD3	8	0.03
(1,845)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:33:PRO:HD3	12	0.03
(1,845)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:33:PRO:HD3	12	0.03
(1,845)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:33:PRO:HD3	12	0.03
(1,845)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:33:PRO:HD3	13	0.03
(1,845)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:33:PRO:HD3	13	0.03
(1,845)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:33:PRO:HD3	13	0.03
(1,841)	1:A:32:ALA:HA	1:A:36:GLU:HB2	7	0.03
(1,835)	1:A:32:ALA:H	1:A:108:THR:HG1	8	0.03
(1,820)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:37:VAL:HG11	3	0.03
(1,820)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:37:VAL:HG12	3	0.03
(1,820)	1:A:30:TYR:HE1	1:A:37:VAL:HG13	3	0.03
(1,807)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HG21	7	0.03
(1,807)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HG22	7	0.03
(1,807)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:140:ILE:HG23	7	0.03
(1,774)	1:A:29:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HB2	19	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,768)	1:A:29:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD11	4	0.03
(1,768)	1:A:29:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD12	4	0.03
(1,768)	1:A:29:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD13	4	0.03
(1,768)	1:A:29:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD11	9	0.03
(1,768)	1:A:29:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD12	9	0.03
(1,768)	1:A:29:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD13	9	0.03
(1,73)	1:A:78:GLU:H	1:A:82:ARG:O	5	0.03
(1,726)	1:A:27:ARG:HG3	1:A:28:GLN:H	10	0.03
(1,721)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:111:GLU:HG2	9	0.03
(1,721)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:111:GLU:HG2	12	0.03
(1,72)	1:A:76:ARG:N	1:A:84:THR:O	20	0.03
(1,71)	1:A:76:ARG:H	1:A:84:THR:O	13	0.03
(1,689)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:28:GLN:HE22	14	0.03
(1,689)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:28:GLN:HE22	14	0.03
(1,689)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:28:GLN:HE22	14	0.03
(1,671)	1:A:26:ILE:HB	1:A:133:LEU:HD11	12	0.03
(1,671)	1:A:26:ILE:HB	1:A:133:LEU:HD12	12	0.03
(1,671)	1:A:26:ILE:HB	1:A:133:LEU:HD13	12	0.03
(1,671)	1:A:26:ILE:HB	1:A:133:LEU:HD11	16	0.03
(1,671)	1:A:26:ILE:HB	1:A:133:LEU:HD12	16	0.03
(1,671)	1:A:26:ILE:HB	1:A:133:LEU:HD13	16	0.03
(1,666)	1:A:26:ILE:HB	1:A:110:LEU:HD21	19	0.03
(1,666)	1:A:26:ILE:HB	1:A:110:LEU:HD22	19	0.03
(1,666)	1:A:26:ILE:HB	1:A:110:LEU:HD23	19	0.03
(1,652)	1:A:25:ILE:HG21	1:A:27:ARG:HG2	13	0.03
(1,652)	1:A:25:ILE:HG22	1:A:27:ARG:HG2	13	0.03
(1,652)	1:A:25:ILE:HG23	1:A:27:ARG:HG2	13	0.03
(1,65)	1:A:71:SER:H	1:A:88:VAL:O	11	0.03
(1,587)	1:A:24:ILE:HD11	1:A:125:VAL:HG21	11	0.03
(1,587)	1:A:24:ILE:HD11	1:A:125:VAL:HG22	11	0.03
(1,587)	1:A:24:ILE:HD11	1:A:125:VAL:HG23	11	0.03
(1,587)	1:A:24:ILE:HD12	1:A:125:VAL:HG21	11	0.03
(1,587)	1:A:24:ILE:HD12	1:A:125:VAL:HG22	11	0.03
(1,587)	1:A:24:ILE:HD12	1:A:125:VAL:HG23	11	0.03
(1,587)	1:A:24:ILE:HD13	1:A:125:VAL:HG21	11	0.03
(1,587)	1:A:24:ILE:HD13	1:A:125:VAL:HG22	11	0.03
(1,587)	1:A:24:ILE:HD13	1:A:125:VAL:HG23	11	0.03
(1,56)	1:A:58:LEU:N	1:A:63:ASN:O	10	0.03
(1,56)	1:A:58:LEU:N	1:A:63:ASN:O	12	0.03
(1,49)	1:A:48:ASN:H	1:A:44:PRO:O	15	0.03
(1,458)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:18:ALA:H	1	0.03
(1,43)	1:A:42:THR:H	1:A:38:TRP:O	6	0.03



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,43)	1:A:42:THR:H	1:A:38:TRP:O	14	0.03
(1,43)	1:A:42:THR:H	1:A:38:TRP:O	19	0.03
(1,409)	1:A:14:ARG:HG2	1:A:15:THR:H	15	0.03
(1,404)	1:A:14:ARG:HB2	1:A:14:ARG:HD2	8	0.03
(1,399)	1:A:14:ARG:HE	1:A:15:THR:H	10	0.03
(1,39)	1:A:40:ALA:H	1:A:36:GLU:O	8	0.03
(1,39)	1:A:40:ALA:H	1:A:36:GLU:O	17	0.03
(1,388)	1:A:14:ARG:H	1:A:22:ARG:HG2	10	0.03
(1,37)	1:A:39:SER:H	1:A:35:ASP:O	4	0.03
(1,37)	1:A:39:SER:H	1:A:35:ASP:O	12	0.03
(1,369)	1:A:13:ARG:H	1:A:23:SER:HG	8	0.03
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD11	11	0.03
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD12	11	0.03
(1,363)	1:A:12:GLY:HA2	1:A:25:ILE:HD13	11	0.03
(1,353)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:25:ILE:HA	6	0.03
(1,353)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:25:ILE:HA	6	0.03
(1,353)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:25:ILE:HA	6	0.03
(1,334)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:22:ARG:HE	13	0.03
(1,334)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:22:ARG:HE	13	0.03
(1,334)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:22:ARG:HE	13	0.03
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD11	3	0.03
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD12	3	0.03
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD13	3	0.03
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD11	3	0.03
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD12	3	0.03
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD13	3	0.03
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD11	3	0.03
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD12	3	0.03
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD13	3	0.03
(1,324)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HB2	12	0.03
(1,324)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HB2	12	0.03
(1,324)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HB2	12	0.03
(1,323)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:12:GLY:H	2	0.03
(1,323)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:12:GLY:H	2	0.03
(1,323)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:12:GLY:H	2	0.03
(1,3)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:O	10	0.03
(1,3)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:O	16	0.03
(1,2714)	1:A:181:GLY:HA2	1:A:182:SER:H	9	0.03
(1,2713)	1:A:181:GLY:H	1:A:182:SER:H	18	0.03
(1,2706)	1:A:179:HIS:H	1:A:180:SER:HB2	19	0.03
(1,270)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:174:TRP:HA	5	0.03
(1,27)	1:A:28:GLN:H	1:A:110:LEU:O	13	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2651)	1:A:175:ALA:HB1	1:A:179:HIS:HD2	4	0.03
(1,2651)	1:A:175:ALA:HB2	1:A:179:HIS:HD2	4	0.03
(1,2651)	1:A:175:ALA:HB3	1:A:179:HIS:HD2	4	0.03
(1,2651)	1:A:175:ALA:HB1	1:A:179:HIS:HD2	6	0.03
(1,2651)	1:A:175:ALA:HB2	1:A:179:HIS:HD2	6	0.03
(1,2651)	1:A:175:ALA:HB3	1:A:179:HIS:HD2	6	0.03
(1,2644)	1:A:175:ALA:HA	1:A:178:VAL:HG21	1	0.03
(1,2644)	1:A:175:ALA:HA	1:A:178:VAL:HG22	1	0.03
(1,2644)	1:A:175:ALA:HA	1:A:178:VAL:HG23	1	0.03
(1,2644)	1:A:175:ALA:HA	1:A:178:VAL:HG21	2	0.03
(1,2644)	1:A:175:ALA:HA	1:A:178:VAL:HG22	2	0.03
(1,2644)	1:A:175:ALA:HA	1:A:178:VAL:HG23	2	0.03
(1,262)	1:A:9:ARG:HG3	1:A:10:ALA:H	2	0.03
(1,2564)	1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HG2	1	0.03
(1,2559)	1:A:166:ILE:HG21	1:A:170:ARG:HE	17	0.03
(1,2559)	1:A:166:ILE:HG22	1:A:170:ARG:HE	17	0.03
(1,2559)	1:A:166:ILE:HG23	1:A:170:ARG:HE	17	0.03
(1,2515)	1:A:164:MET:HE1	1:A:168:GLN:HE22	20	0.03
(1,2515)	1:A:164:MET:HE2	1:A:168:GLN:HE22	20	0.03
(1,2515)	1:A:164:MET:HE3	1:A:168:GLN:HE22	20	0.03
(1,2492)	1:A:163:MET:H	1:A:164:MET:HG2	3	0.03
(1,2469)	1:A:160:SER:HA	1:A:163:MET:H	11	0.03
(1,2469)	1:A:160:SER:HA	1:A:163:MET:H	20	0.03
(1,2452)	1:A:157:PHE:HA	1:A:158:GLU:H	11	0.03
(1,2446)	1:A:156:GLU:HA	1:A:157:PHE:H	15	0.03
(1,2431)	1:A:153:ALA:HA	1:A:154:ALA:H	15	0.03
(1,2421)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:H	3	0.03
(1,2416)	1:A:151:GLU:H	1:A:153:ALA:HB1	1	0.03
(1,2416)	1:A:151:GLU:H	1:A:153:ALA:HB2	1	0.03
(1,2416)	1:A:151:GLU:H	1:A:153:ALA:HB3	1	0.03
(1,2416)	1:A:151:GLU:H	1:A:153:ALA:HB1	15	0.03
(1,2416)	1:A:151:GLU:H	1:A:153:ALA:HB2	15	0.03
(1,2416)	1:A:151:GLU:H	1:A:153:ALA:HB3	15	0.03
(1,2402)	1:A:149:VAL:HB	1:A:152:ASP:H	18	0.03
(1,2400)	1:A:149:VAL:HB	1:A:150:PRO:HD2	5	0.03
(1,2365)	1:A:143:ASP:H	1:A:143:ASP:HB2	17	0.03
(1,2335)	1:A:139:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HG	16	0.03
(1,2335)	1:A:139:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HG	16	0.03
(1,233)	1:A:8:GLU:HB2	1:A:27:ARG:HB2	17	0.03
(1,2326)	1:A:139:PHE:HA	1:A:144:LEU:HD21	9	0.03
(1,2326)	1:A:139:PHE:HA	1:A:144:LEU:HD22	9	0.03
(1,2326)	1:A:139:PHE:HA	1:A:144:LEU:HD23	9	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2262)	1:A:133:LEU:HD11	1:A:136:LEU:HD11	11	0.03
	1:A:133:LEU:HD11	1:A:136:LEU:HD12	11	0.03
(1,2262)	1:A:133:LEU:HD11	1:A:136:LEU:HD13	11	0.03
(1,2262)	1:A:133:LEU:HD12	1:A:136:LEU:HD11	11	0.03
(1,2262)	1:A:133:LEU:HD12	1:A:136:LEU:HD12	11	0.03
(1,2262)	1:A:133:LEU:HD12	1:A:136:LEU:HD13	11	0.03
(1,2262)	1:A:133:LEU:HD13	1:A:136:LEU:HD11	11	0.03
(1,2262)	1:A:133:LEU:HD13	1:A:136:LEU:HD12	11	0.03
(1,2262)	1:A:133:LEU:HD13	1:A:136:LEU:HD13	11	0.03
(1,2219)	1:A:130:GLU:HG3	1:A:174:TRP:HE1	4	0.03
(1,2184)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:174:TRP:HD1	5	0.03
(1,2184)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:174:TRP:HD1	5	0.03
(1,2184)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:174:TRP:HD1	5	0.03
(1,2126)	1:A:123:VAL:HG21	1:A:179:HIS:HD2	3	0.03
(1,2126)	1:A:123:VAL:HG22	1:A:179:HIS:HD2	3	0.03
(1,2126)	1:A:123:VAL:HG23	1:A:179:HIS:HD2	3	0.03
(1,2116)	1:A:123:VAL:HG11	1:A:175:ALA:HA	2	0.03
(1,2116)	1:A:123:VAL:HG12	1:A:175:ALA:HA	2	0.03
(1,2116)	1:A:123:VAL:HG13	1:A:175:ALA:HA	2	0.03
(1,2116)	1:A:123:VAL:HG11	1:A:175:ALA:HA	3	0.03
(1,2116)	1:A:123:VAL:HG12	1:A:175:ALA:HA	3	0.03
(1,2116)	1:A:123:VAL:HG13	1:A:175:ALA:HA	3	0.03
(1,207)	1:A:7:THR:HA	1:A:27:ARG:H	16	0.03
(1,2047)	1:A:120:GLN:HA	1:A:120:GLN:HE21	12	0.03
(1,2034)	1:A:119:GLU:HG2	1:A:122:LEU:HD11	11	0.03
(1,2034)	1:A:119:GLU:HG2	1:A:122:LEU:HD12	11	0.03
(1,2034)	1:A:119:GLU:HG2	1:A:122:LEU:HD13	11	0.03
(1,2019)	1:A:118:SER:HA	1:A:121:MET:H	12	0.03
(1,200)	1:A:5:GLN:HG2	1:A:6:ALA:H	12	0.03
(1,1999)	1:A:116:THR:HG21	1:A:121:MET:HB2	13	0.03
(1,1999)	1:A:116:THR:HG22	1:A:121:MET:HB2	13	0.03
(1,1999)	1:A:116:THR:HG23	1:A:121:MET:HB2	13	0.03
(1,1996)	1:A:116:THR:HG21	1:A:118:SER:H	16	0.03
(1,1996)	1:A:116:THR:HG22	1:A:118:SER:H	16	0.03
(1,1996)	1:A:116:THR:HG23	1:A:118:SER:H	16	0.03
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:133:LEU:HD11	1	0.03
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:133:LEU:HD12	1	0.03
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:133:LEU:HD13	1	0.03
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:133:LEU:HD11	1	0.03
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:133:LEU:HD12	1	0.03
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:133:LEU:HD13	1	0.03
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HD11	1	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HD12	1	0.03
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HD13	1	0.03
(1,192)	1:A:179:HIS:N	1:A:175:ALA:O	5	0.03
(1,1908)	1:A:109:LEU:HG	1:A:111:GLU:HG2	19	0.03
(1,1891)	1:A:108:THR:HG1	1:A:109:LEU:H	4	0.03
(1,1891)	1:A:108:THR:HG1	1:A:109:LEU:H	6	0.03
(1,187)	1:A:177:LEU:H	1:A:173:ALA:O	11	0.03
(1,1867)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:H	15	0.03
(1,186)	1:A:176:ALA:N	1:A:172:GLU:O	8	0.03
(1,1859)	1:A:104:GLU:HA	1:A:107:GLY:H	16	0.03
(1,1854)	1:A:104:GLU:H	1:A:108:THR:HG21	1	0.03
(1,1854)	1:A:104:GLU:H	1:A:108:THR:HG22	1	0.03
(1,1854)	1:A:104:GLU:H	1:A:108:THR:HG23	1	0.03
(1,185)	1:A:176:ALA:H	1:A:172:GLU:O	4	0.03
(1,1838)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:HD21	8	0.03
(1,1838)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:HD22	8	0.03
(1,1838)	1:A:102:SER:HB2	1:A:109:LEU:HD23	8	0.03
(1,1829)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:HD21	4	0.03
(1,1829)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:HD22	4	0.03
(1,1829)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:HD23	4	0.03
(1,1829)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:HD21	5	0.03
(1,1829)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:HD22	5	0.03
(1,1829)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:HD23	5	0.03
(1,1829)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:HD21	8	0.03
(1,1829)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:HD22	8	0.03
(1,1829)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:HD23	8	0.03
(1,179)	1:A:173:ALA:H	1:A:169:GLU:O	15	0.03
(1,175)	1:A:171:GLY:H	1:A:167:SER:O	3	0.03
(1,1731)	1:A:96:GLU:H	1:A:114:HIS:HD2	1	0.03
(1,1731)	1:A:96:GLU:H	1:A:114:HIS:HD2	18	0.03
(1,173)	1:A:170:ARG:H	1:A:166:ILE:O	7	0.03
(1,173)	1:A:170:ARG:H	1:A:166:ILE:O	8	0.03
(1,1719)	1:A:93:PRO:HA	1:A:94:ASP:H	18	0.03
(1,1715)	1:A:92:LYS:HE2	1:A:121:MET:HE1	20	0.03
(1,1715)	1:A:92:LYS:HE2	1:A:121:MET:HE2	20	0.03
(1,1715)	1:A:92:LYS:HE2	1:A:121:MET:HE3	20	0.03
(1,171)	1:A:169:GLU:H	1:A:165:ARG:O	4	0.03
(1,169)	1:A:168:GLN:H	1:A:164:MET:O	9	0.03
(1,1674)	1:A:89:TYR:HA	1:A:90:GLU:HB2	16	0.03
(1,167)	1:A:167:SER:H	1:A:163:MET:O	3	0.03
(1,166)	1:A:166:ILE:N	1:A:162:GLU:O	20	0.03
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE1	5	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE2	5	0.03
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE3	5	0.03
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE1	6	0.03
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE2	6	0.03
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE3	6	0.03
(1,16)	1:A:22:ARG:N	1:A:116:THR:O	19	0.03
(1,16)	1:A:22:ARG:N	1:A:116:THR:O	20	0.03
(1,159)	1:A:141:ARG:H	1:A:137:GLY:O	16	0.03
(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD11	10	0.03
(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD12	10	0.03
(1,1582)	1:A:83:LEU:HB2	1:A:99:LEU:HD13	10	0.03
(1,1573)	1:A:83:LEU:H	1:A:83:LEU:HD21	1	0.03
(1,1573)	1:A:83:LEU:H	1:A:83:LEU:HD22	1	0.03
(1,1573)	1:A:83:LEU:H	1:A:83:LEU:HD23	1	0.03
(1,1565)	1:A:82:ARG:HB3	1:A:99:LEU:H	14	0.03
(1,1518)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:84:THR:H	11	0.03
(1,151)	1:A:137:GLY:H	1:A:133:LEU:O	9	0.03
(1,1501)	1:A:75:LEU:HD11	1:A:86:SER:HA	20	0.03
(1,1501)	1:A:75:LEU:HD12	1:A:86:SER:HA	20	0.03
(1,1501)	1:A:75:LEU:HD13	1:A:86:SER:HA	20	0.03
(1,1473)	1:A:74:ILE:HA	1:A:85:ILE:HG21	9	0.03
(1,1473)	1:A:74:ILE:HA	1:A:85:ILE:HG22	9	0.03
(1,1473)	1:A:74:ILE:HA	1:A:85:ILE:HG23	9	0.03
(1,147)	1:A:135:PHE:H	1:A:131:MET:O	1	0.03
(1,1461)	1:A:73:ASP:H	1:A:88:VAL:HG21	3	0.03
(1,1461)	1:A:73:ASP:H	1:A:88:VAL:HG22	3	0.03
(1,1461)	1:A:73:ASP:H	1:A:88:VAL:HG23	3	0.03
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB1	1:A:89:TYR:HD1	2	0.03
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB2	1:A:89:TYR:HD1	2	0.03
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB3	1:A:89:TYR:HD1	2	0.03
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB1	1:A:89:TYR:HD1	13	0.03
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB2	1:A:89:TYR:HD1	13	0.03
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB3	1:A:89:TYR:HD1	13	0.03
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB1	1:A:89:TYR:HD1	15	0.03
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB2	1:A:89:TYR:HD1	15	0.03
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB3	1:A:89:TYR:HD1	15	0.03
(1,144)	1:A:133:LEU:N	1:A:129:TRP:O	7	0.03
(1,141)	1:A:132:ALA:H	1:A:128:GLY:O	13	0.03
(1,1407)	1:A:67:GLN:HA	1:A:68:GLY:H	11	0.03
(1,139)	1:A:131:MET:H	1:A:127:VAL:O	14	0.03
(1,138)	1:A:130:GLU:N	1:A:126:GLY:O	15	0.03
(1,138)	1:A:130:GLU:N	1:A:126:GLY:O	16	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	5	0.03
(1,1348)	1:A:63:ASN:HB2	1:A:63:ASN:HD21	14	0.03
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD11	7	0.03
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD12	7	0.03
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD13	7	0.03
(1,133)	1:A:128:GLY:H	1:A:124:GLU:O	8	0.03
(1,132)	1:A:127:VAL:N	1:A:123:VAL:O	1	0.03
(1,1319)	1:A:59:ARG:HG2	1:A:59:ARG:HE	2	0.03
(1,131)	1:A:127:VAL:H	1:A:123:VAL:O	2	0.03
(1,131)	1:A:127:VAL:H	1:A:123:VAL:O	4	0.03
(1,131)	1:A:127:VAL:H	1:A:123:VAL:O	13	0.03
(1,1255)	1:A:54:PRO:HB2	1:A:64:PHE:HB2	18	0.03
(1,125)	1:A:124:GLU:H	1:A:120:GLN:O	17	0.03
(1,125)	1:A:124:GLU:H	1:A:120:GLN:O	19	0.03
(1,1245)	1:A:53:GLU:HG2	1:A:54:PRO:HA	1	0.03
(1,124)	1:A:123:VAL:N	1:A:119:GLU:O	1	0.03
(1,124)	1:A:123:VAL:N	1:A:119:GLU:O	3	0.03
(1,124)	1:A:123:VAL:N	1:A:119:GLU:O	15	0.03
(1,1238)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:67:GLN:HG2	2	0.03
(1,1238)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:67:GLN:HG2	2	0.03
(1,1238)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:67:GLN:HG2	2	0.03
(1,123)	1:A:123:VAL:H	1:A:119:GLU:O	20	0.03
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD21	15	0.03
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD22	15	0.03
(1,1208)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:66:LEU:HD23	15	0.03
(1,1203)	1:A:51:PHE:HE1	1:A:129:TRP:HZ3	9	0.03
(1,1192)	1:A:51:PHE:HZ	1:A:129:TRP:HH2	3	0.03
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE1	7	0.03
(1,1153)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HG2	7	0.03
(1,115)	1:A:114:HIS:H	1:A:24:ILE:O	18	0.03
(1,105)	1:A:109:LEU:H	1:A:102:SER:O	12	0.03
(1,1033)	1:A:40:ALA:HA	1:A:46:ARG:HB3	19	0.03
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD11	12	0.03
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD12	12	0.03
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD13	12	0.03
(1,976)	1:A:38:TRP:H	1:A:108:THR:HG21	2	0.02
(1,976)	1:A:38:TRP:H	1:A:108:THR:HG22	2	0.02
(1,976)	1:A:38:TRP:H	1:A:108:THR:HG23	2	0.02
(1,975)	1:A:38:TRP:H	1:A:101:LEU:HD21	7	0.02
(1,975)	1:A:38:TRP:H	1:A:101:LEU:HD22	7	0.02
(1,975)	1:A:38:TRP:H	1:A:101:LEU:HD23	7	0.02
(1,972)	1:A:37:VAL:HG21	1:A:140:ILE:HD11	3	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,972)	1:A:37:VAL:HG21	1:A:140:ILE:HD12	3	0.02
(1,972)	1:A:37:VAL:HG21	1:A:140:ILE:HD13	3	0.02
(1,972)	1:A:37:VAL:HG22	1:A:140:ILE:HD11	3	0.02
(1,972)	1:A:37:VAL:HG22	1:A:140:ILE:HD12	3	0.02
(1,972)	1:A:37:VAL:HG22	1:A:140:ILE:HD13	3	0.02
(1,972)	1:A:37:VAL:HG23	1:A:140:ILE:HD11	3	0.02
(1,972)	1:A:37:VAL:HG23	1:A:140:ILE:HD12	3	0.02
(1,972)	1:A:37:VAL:HG23	1:A:140:ILE:HD13	3	0.02
(1,968)	1:A:37:VAL:HG21	1:A:108:THR:HA	18	0.02
(1,968)	1:A:37:VAL:HG22	1:A:108:THR:HA	18	0.02
(1,968)	1:A:37:VAL:HG23	1:A:108:THR:HA	18	0.02
(1,940)	1:A:36:GLU:HG2	1:A:37:VAL:H	2	0.02
(1,902)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:80:PRO:HB2	15	0.02
(1,902)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:80:PRO:HB2	15	0.02
(1,902)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:80:PRO:HB2	15	0.02
(1,9)	1:A:16:ILE:H	1:A:19:GLY:O	15	0.02
(1,9)	1:A:16:ILE:H	1:A:19:GLY:O	16	0.02
(1,893)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:H	6	0.02
(1,893)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:H	6	0.02
(1,893)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:H	6	0.02
(1,893)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:H	20	0.02
(1,893)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:H	20	0.02
(1,893)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:H	20	0.02
(1,869)	1:A:34:VAL:H	1:A:103:GLU:HG3	4	0.02
(1,86)	1:A:87:TRP:N	1:A:95:SER:O	8	0.02
(1,85)	1:A:87:TRP:H	1:A:95:SER:O	7	0.02
(1,845)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:33:PRO:HD3	5	0.02
(1,845)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:33:PRO:HD3	5	0.02
(1,845)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:33:PRO:HD3	5	0.02
(1,841)	1:A:32:ALA:HA	1:A:36:GLU:HB2	4	0.02
(1,825)	1:A:31:ASP:HA	1:A:107:GLY:H	16	0.02
(1,821)	1:A:31:ASP:H	1:A:140:ILE:HG21	15	0.02
(1,821)	1:A:31:ASP:H	1:A:140:ILE:HG22	15	0.02
(1,821)	1:A:31:ASP:H	1:A:140:ILE:HG23	15	0.02
(1,791)	1:A:30:TYR:HB3	1:A:32:ALA:HB1	2	0.02
(1,791)	1:A:30:TYR:HB3	1:A:32:ALA:HB2	2	0.02
(1,791)	1:A:30:TYR:HB3	1:A:32:ALA:HB3	2	0.02
(1,774)	1:A:29:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HB2	18	0.02
(1,77)	1:A:83:LEU:H	1:A:99:LEU:O	2	0.02
(1,749)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HD1	19	0.02
(1,748)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HD11	14	0.02
(1,748)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HD12	14	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,748)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:110:LEU:HD13	14	0.02
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD21	20	0.02
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD22	20	0.02
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD23	20	0.02
(1,721)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:111:GLU:HG2	7	0.02
(1,71)	1:A:76:ARG:H	1:A:84:THR:O	16	0.02
(1,689)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:28:GLN:HE22	2	0.02
(1,689)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:28:GLN:HE22	2	0.02
(1,689)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:28:GLN:HE22	2	0.02
(1,673)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:112:LEU:HD11	15	0.02
(1,673)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:112:LEU:HD12	15	0.02
(1,673)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:112:LEU:HD13	15	0.02
(1,673)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:112:LEU:HD11	15	0.02
(1,673)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:112:LEU:HD12	15	0.02
(1,673)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:112:LEU:HD13	15	0.02
(1,673)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:112:LEU:HD11	15	0.02
(1,673)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:112:LEU:HD12	15	0.02
(1,673)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:112:LEU:HD13	15	0.02
(1,67)	1:A:72:GLY:H	1:A:64:PHE:O	14	0.02
(1,658)	1:A:26:ILE:H	1:A:112:LEU:HD21	10	0.02
(1,658)	1:A:26:ILE:H	1:A:112:LEU:HD22	10	0.02
(1,658)	1:A:26:ILE:H	1:A:112:LEU:HD23	10	0.02
(1,655)	1:A:26:ILE:H	1:A:111:GLU:HA	13	0.02
(1,65)	1:A:71:SER:H	1:A:88:VAL:O	19	0.02
(1,64)	1:A:65:ALA:N	1:A:55:LYS:O	6	0.02
(1,61)	1:A:64:PHE:H	1:A:72:GLY:O	15	0.02
(1,56)	1:A:58:LEU:N	1:A:63:ASN:O	6	0.02
(1,56)	1:A:58:LEU:N	1:A:63:ASN:O	18	0.02
(1,56)	1:A:58:LEU:N	1:A:63:ASN:O	20	0.02
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG21	12	0.02
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG22	12	0.02
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG23	12	0.02
(1,486)	1:A:18:ALA:HB1	1:A:19:GLY:H	11	0.02
(1,486)	1:A:18:ALA:HB2	1:A:19:GLY:H	11	0.02
(1,486)	1:A:18:ALA:HB3	1:A:19:GLY:H	11	0.02
(1,474)	1:A:16:ILE:HG21	1:A:96:GLU:HG2	6	0.02
(1,474)	1:A:16:ILE:HG22	1:A:96:GLU:HG2	6	0.02
(1,474)	1:A:16:ILE:HG23	1:A:96:GLU:HG2	6	0.02
(1,45)	1:A:43:ASP:H	1:A:39:SER:O	1	0.02
(1,446)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HG21	8	0.02
(1,446)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HG22	8	0.02
(1,446)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HG23	8	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,446)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HG21	8	0.02
(1,446)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HG22	8	0.02
(1,446)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HG23	8	0.02
(1,446)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HG21	8	0.02
(1,446)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HG22	8	0.02
(1,446)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HG23	8	0.02
(1,43)	1:A:42:THR:H	1:A:38:TRP:O	16	0.02
(1,43)	1:A:42:THR:H	1:A:38:TRP:O	20	0.02
(1,424)	1:A:15:THR:HG21	1:A:21:ALA:H	11	0.02
(1,424)	1:A:15:THR:HG22	1:A:21:ALA:H	11	0.02
(1,424)	1:A:15:THR:HG23	1:A:21:ALA:H	11	0.02
(1,424)	1:A:15:THR:HG21	1:A:21:ALA:H	19	0.02
(1,424)	1:A:15:THR:HG22	1:A:21:ALA:H	19	0.02
(1,424)	1:A:15:THR:HG23	1:A:21:ALA:H	19	0.02
(1,397)	1:A:14:ARG:HB3	1:A:16:ILE:HG21	3	0.02
(1,397)	1:A:14:ARG:HB3	1:A:16:ILE:HG22	3	0.02
(1,397)	1:A:14:ARG:HB3	1:A:16:ILE:HG23	3	0.02
(1,394)	1:A:14:ARG:HB2	1:A:16:ILE:HG21	20	0.02
(1,394)	1:A:14:ARG:HB2	1:A:16:ILE:HG22	20	0.02
(1,394)	1:A:14:ARG:HB2	1:A:16:ILE:HG23	20	0.02
(1,38)	1:A:39:SER:N	1:A:35:ASP:O	15	0.02
(1,370)	1:A:13:ARG:H	1:A:25:ILE:HD11	17	0.02
(1,370)	1:A:13:ARG:H	1:A:25:ILE:HD12	17	0.02
(1,370)	1:A:13:ARG:H	1:A:25:ILE:HD13	17	0.02
(1,37)	1:A:39:SER:H	1:A:35:ASP:O	5	0.02
(1,37)	1:A:39:SER:H	1:A:35:ASP:O	6	0.02
(1,367)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HD2	18	0.02
(1,355)	1:A:12:GLY:H	1:A:23:SER:H	9	0.02
(1,324)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HB2	15	0.02
(1,324)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HB2	15	0.02
(1,324)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HB2	15	0.02
(1,324)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HB2	19	0.02
(1,324)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HB2	19	0.02
(1,324)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HB2	19	0.02
(1,30)	1:A:29:ARG:N	1:A:6:ALA:O	12	0.02
(1,3)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:O	3	0.02
(1,3)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:O	15	0.02
(1,3)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:O	18	0.02
(1,29)	1:A:29:ARG:H	1:A:6:ALA:O	11	0.02
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD11	10	0.02
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD12	10	0.02
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD13	10	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD11	13	0.02
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD12	13	0.02
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD13	13	0.02
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD11	6	0.02
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD12	6	0.02
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD13	6	0.02
(1,2714)	1:A:181:GLY:HA2	1:A:182:SER:H	3	0.02
(1,2714)	1:A:181:GLY:HA2	1:A:182:SER:H	16	0.02
(1,27)	1:A:28:GLN:H	1:A:110:LEU:O	10	0.02
(1,2683)	1:A:177:LEU:HD11	1:A:178:VAL:H	13	0.02
(1,2683)	1:A:177:LEU:HD12	1:A:178:VAL:H	13	0.02
(1,2683)	1:A:177:LEU:HD13	1:A:178:VAL:H	13	0.02
(1,2654)	1:A:176:ALA:H	1:A:177:LEU:HB2	19	0.02
(1,2651)	1:A:175:ALA:HB1	1:A:179:HIS:HD2	10	0.02
(1,2651)	1:A:175:ALA:HB2	1:A:179:HIS:HD2	10	0.02
(1,2651)	1:A:175:ALA:HB3	1:A:179:HIS:HD2	10	0.02
(1,2644)	1:A:175:ALA:HA	1:A:178:VAL:HG21	5	0.02
(1,2644)	1:A:175:ALA:HA	1:A:178:VAL:HG22	5	0.02
(1,2644)	1:A:175:ALA:HA	1:A:178:VAL:HG23	5	0.02
(1,2557)	1:A:166:ILE:HG21	1:A:167:SER:HB2	20	0.02
(1,2557)	1:A:166:ILE:HG22	1:A:167:SER:HB2	20	0.02
(1,2557)	1:A:166:ILE:HG23	1:A:167:SER:HB2	20	0.02
(1,2548)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:169:GLU:HB2	18	0.02
(1,2548)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:169:GLU:HB3	18	0.02
(1,2548)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:169:GLU:HB2	18	0.02
(1,2548)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:169:GLU:HB3	18	0.02
(1,2548)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:169:GLU:HB2	18	0.02
(1,2548)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:169:GLU:HB3	18	0.02
(1,2526)	1:A:165:ARG:HA	1:A:168:GLN:HG2	15	0.02
(1,2518)	1:A:164:MET:HG2	1:A:165:ARG:H	20	0.02
(1,2502)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HD11	8	0.02
(1,2502)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HD12	8	0.02
(1,2502)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HD13	8	0.02
(1,2502)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HD11	8	0.02
(1,2502)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HD12	8	0.02
(1,2502)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HD13	8	0.02
(1,2502)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HD11	8	0.02
(1,2502)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HD12	8	0.02
(1,2502)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HD13	8	0.02
(1,2492)	1:A:163:MET:H	1:A:164:MET:HG2	14	0.02
(1,2477)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HG2	3	0.02
(1,2476)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HE1	17	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2476)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HE2	17	0.02
(1,2476)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HE3	17	0.02
(1,2469)	1:A:160:SER:HA	1:A:163:MET:H	4	0.02
(1,2465)	1:A:159:PRO:HG2	1:A:160:SER:H	9	0.02
(1,2456)	1:A:158:GLU:H	1:A:159:PRO:HD2	1	0.02
(1,2452)	1:A:157:PHE:HA	1:A:158:GLU:H	7	0.02
(1,2452)	1:A:157:PHE:HA	1:A:158:GLU:H	9	0.02
(1,2446)	1:A:156:GLU:HA	1:A:157:PHE:H	4	0.02
(1,2446)	1:A:156:GLU:HA	1:A:157:PHE:H	13	0.02
(1,2427)	1:A:152:ASP:HA	1:A:154:ALA:H	4	0.02
(1,2425)	1:A:152:ASP:HA	1:A:153:ALA:H	7	0.02
(1,2415)	1:A:151:GLU:H	1:A:152:ASP:H	14	0.02
(1,2410)	1:A:150:PRO:HB2	1:A:151:GLU:H	15	0.02
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:150:PRO:HD2	17	0.02
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:150:PRO:HD2	17	0.02
(1,2403)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:150:PRO:HD2	17	0.02
(1,2386)	1:A:147:GLY:H	1:A:148:PRO:HD2	5	0.02
(1,2385)	1:A:146:GLY:HA2	1:A:147:GLY:H	11	0.02
(1,2382)	1:A:145:PRO:HA	1:A:146:GLY:H	6	0.02
(1,235)	1:A:8:GLU:HB3	1:A:27:ARG:H	8	0.02
(1,235)	1:A:8:GLU:HB3	1:A:27:ARG:H	9	0.02
(1,235)	1:A:8:GLU:HB3	1:A:27:ARG:H	13	0.02
(1,2335)	1:A:139:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HG	18	0.02
(1,2335)	1:A:139:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HG	18	0.02
(1,2314)	1:A:138:MET:HE1	1:A:143:ASP:HB3	2	0.02
(1,2314)	1:A:138:MET:HE2	1:A:143:ASP:HB3	2	0.02
(1,2314)	1:A:138:MET:HE3	1:A:143:ASP:HB3	2	0.02
(1,2288)	1:A:136:LEU:HD11	1:A:139:PHE:HD1	8	0.02
(1,2288)	1:A:136:LEU:HD11	1:A:139:PHE:HD2	8	0.02
(1,2288)	1:A:136:LEU:HD12	1:A:139:PHE:HD1	8	0.02
(1,2288)	1:A:136:LEU:HD12	1:A:139:PHE:HD2	8	0.02
(1,2288)	1:A:136:LEU:HD13	1:A:139:PHE:HD1	8	0.02
(1,2288)	1:A:136:LEU:HD13	1:A:139:PHE:HD2	8	0.02
(1,2181)	1:A:127:VAL:HG11	1:A:170:ARG:HB2	19	0.02
(1,2181)	1:A:127:VAL:HG12	1:A:170:ARG:HB2	19	0.02
(1,2181)	1:A:127:VAL:HG13	1:A:170:ARG:HB2	19	0.02
(1,2147)	1:A:125:VAL:HB	1:A:129:TRP:HD1	9	0.02
(1,2147)	1:A:125:VAL:HB	1:A:129:TRP:HD1	13	0.02
(1,2051)	1:A:120:GLN:HB3	1:A:121:MET:H	1	0.02
(1,2042)	1:A:119:GLU:HG2	1:A:178:VAL:HG11	19	0.02
(1,2042)	1:A:119:GLU:HG2	1:A:178:VAL:HG12	19	0.02
(1,2042)	1:A:119:GLU:HG2	1:A:178:VAL:HG13	19	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2016)	1:A:118:SER:H	1:A:121:MET:HB2	17	0.02
(1,2004)	1:A:116:THR:HG21	1:A:122:LEU:HG	2	0.02
(1,2004)	1:A:116:THR:HG22	1:A:122:LEU:HG	2	0.02
(1,2004)	1:A:116:THR:HG23	1:A:122:LEU:HG	2	0.02
(1,1999)	1:A:116:THR:HG21	1:A:121:MET:HB2	9	0.02
(1,1999)	1:A:116:THR:HG22	1:A:121:MET:HB2	9	0.02
(1,1999)	1:A:116:THR:HG23	1:A:121:MET:HB2	9	0.02
(1,1957)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:133:LEU:HD21	20	0.02
(1,1957)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:133:LEU:HD22	20	0.02
(1,1957)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:133:LEU:HD23	20	0.02
(1,1957)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:133:LEU:HD21	20	0.02
(1,1957)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:133:LEU:HD22	20	0.02
(1,1957)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:133:LEU:HD23	20	0.02
(1,1957)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HD21	20	0.02
(1,1957)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HD22	20	0.02
(1,1957)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HD23	20	0.02
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:133:LEU:HD11	12	0.02
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:133:LEU:HD12	12	0.02
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:133:LEU:HD13	12	0.02
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:133:LEU:HD11	12	0.02
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:133:LEU:HD12	12	0.02
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:133:LEU:HD13	12	0.02
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HD11	12	0.02
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HD12	12	0.02
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HD13	12	0.02
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HD21	16	0.02
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HD22	16	0.02
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HD23	16	0.02
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HD21	16	0.02
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HD22	16	0.02
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HD23	16	0.02
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HD21	16	0.02
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HD22	16	0.02
(1,1947)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HD23	16	0.02
(1,1944)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:GLU:H	20	0.02
(1,1944)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:GLU:H	20	0.02
(1,1944)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:GLU:H	20	0.02
(1,193)	1:A:5:GLN:H	1:A:5:GLN:HB2	12	0.02
(1,192)	1:A:179:HIS:N	1:A:175:ALA:O	15	0.02
(1,192)	1:A:179:HIS:N	1:A:175:ALA:O	18	0.02
(1,191)	1:A:179:HIS:H	1:A:175:ALA:O	10	0.02
(1,1891)	1:A:108:THR:HG1	1:A:109:LEU:H	2	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,189)	1:A:178:VAL:H	1:A:174:TRP:O	19	0.02
(1,187)	1:A:177:LEU:H	1:A:173:ALA:O	18	0.02
(1,1869)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:HD21	2	0.02
(1,1869)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:HD22	2	0.02
(1,1869)	1:A:104:GLU:HG2	1:A:109:LEU:HD23	2	0.02
(1,1848)	1:A:103:GLU:HG3	1:A:104:GLU:H	20	0.02
(1,1829)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:HD21	19	0.02
(1,1829)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:HD22	19	0.02
(1,1829)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:HD23	19	0.02
(1,182)	1:A:174:TRP:N	1:A:170:ARG:O	5	0.02
(1,181)	1:A:174:TRP:H	1:A:170:ARG:O	1	0.02
(1,181)	1:A:174:TRP:H	1:A:170:ARG:O	20	0.02
(1,180)	1:A:173:ALA:N	1:A:169:GLU:O	16	0.02
(1,179)	1:A:173:ALA:H	1:A:169:GLU:O	13	0.02
(1,179)	1:A:173:ALA:H	1:A:169:GLU:O	18	0.02
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HG	5	0.02
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HG	5	0.02
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HG	5	0.02
(1,1777)	1:A:99:LEU:HG	1:A:112:LEU:HD11	7	0.02
(1,1777)	1:A:99:LEU:HG	1:A:112:LEU:HD12	7	0.02
(1,1777)	1:A:99:LEU:HG	1:A:112:LEU:HD13	7	0.02
(1,176)	1:A:171:GLY:N	1:A:167:SER:O	9	0.02
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD21	4	0.02
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD22	4	0.02
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD23	4	0.02
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD21	4	0.02
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD22	4	0.02
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD23	4	0.02
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD21	4	0.02
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD22	4	0.02
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD23	4	0.02
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD21	13	0.02
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD22	13	0.02
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD23	13	0.02
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD21	13	0.02
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD22	13	0.02
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD23	13	0.02
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD21	13	0.02
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD22	13	0.02
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD23	13	0.02
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD21	14	0.02
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD22	14	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD23	14	0.02
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD21	14	0.02
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD22	14	0.02
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD23	14	0.02
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD21	14	0.02
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD22	14	0.02
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD23	14	0.02
(1,1731)	1:A:96:GLU:H	1:A:114:HIS:HD2	2	0.02
(1,1731)	1:A:96:GLU:H	1:A:114:HIS:HD2	4	0.02
(1,1728)	1:A:95:SER:HB2	1:A:114:HIS:HD2	9	0.02
(1,1713)	1:A:92:LYS:HB2	1:A:93:PRO:HD2	20	0.02
(1,17)	1:A:23:SER:H	1:A:12:GLY:O	15	0.02
(1,169)	1:A:168:GLN:H	1:A:164:MET:O	4	0.02
(1,1686)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:HD2	10	0.02
(1,167)	1:A:167:SER:H	1:A:163:MET:O	17	0.02
(1,1652)	1:A:87:TRP:HZ2	1:A:121:MET:HE1	19	0.02
(1,1652)	1:A:87:TRP:HZ2	1:A:121:MET:HE2	19	0.02
(1,1652)	1:A:87:TRP:HZ2	1:A:121:MET:HE3	19	0.02
(1,1646)	1:A:87:TRP:HE1	1:A:89:TYR:HB2	1	0.02
(1,161)	1:A:164:MET:H	1:A:160:SER:O	6	0.02
(1,16)	1:A:22:ARG:N	1:A:116:THR:O	17	0.02
(1,1583)	1:A:83:LEU:HD11	1:A:84:THR:H	20	0.02
(1,1583)	1:A:83:LEU:HD12	1:A:84:THR:H	20	0.02
(1,1583)	1:A:83:LEU:HD13	1:A:84:THR:H	20	0.02
(1,1570)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:83:LEU:H	3	0.02
(1,1570)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:83:LEU:H	6	0.02
(1,1565)	1:A:82:ARG:HB3	1:A:99:LEU:H	9	0.02
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB1	1:A:89:TYR:HD1	11	0.02
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB2	1:A:89:TYR:HD1	11	0.02
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB3	1:A:89:TYR:HD1	11	0.02
(1,1416)	1:A:69:ASN:H	1:A:69:ASN:HB2	18	0.02
(1,141)	1:A:132:ALA:H	1:A:128:GLY:O	2	0.02
(1,141)	1:A:132:ALA:H	1:A:128:GLY:O	8	0.02
(1,138)	1:A:130:GLU:N	1:A:126:GLY:O	11	0.02
(1,1342)	1:A:63:ASN:HA	1:A:73:ASP:HA	1	0.02
(1,1342)	1:A:63:ASN:HA	1:A:73:ASP:HA	15	0.02
(1,1334)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:H	14	0.02
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD11	1	0.02
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD12	1	0.02
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD13	1	0.02
(1,13)	1:A:21:ALA:H	1:A:14:ARG:O	5	0.02
(1,13)	1:A:21:ALA:H	1:A:14:ARG:O	8	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,13)	1:A:21:ALA:H	1:A:14:ARG:O	14	0.02
(1,1261)	1:A:55:LYS:H	1:A:64:PHE:HB2	18	0.02
(1,1261)	1:A:55:LYS:H	1:A:64:PHE:HB2	19	0.02
(1,125)	1:A:124:GLU:H	1:A:120:GLN:O	3	0.02
(1,1241)	1:A:53:GLU:H	1:A:53:GLU:HB2	6	0.02
(1,124)	1:A:123:VAL:N	1:A:119:GLU:O	11	0.02
(1,124)	1:A:123:VAL:N	1:A:119:GLU:O	16	0.02
(1,1231)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:55:LYS:H	8	0.02
(1,1231)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:55:LYS:H	8	0.02
(1,1231)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:55:LYS:H	8	0.02
(1,1227)	1:A:52:ILE:HG12	1:A:53:GLU:H	7	0.02
(1,1221)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:69:ASN:H	15	0.02
(1,1221)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:69:ASN:H	15	0.02
(1,1221)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:69:ASN:H	15	0.02
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:68:GLY:HA2	20	0.02
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:68:GLY:HA2	20	0.02
(1,1220)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:68:GLY:HA2	20	0.02
(1,1218)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:66:LEU:HD11	15	0.02
(1,1218)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:66:LEU:HD12	15	0.02
(1,1218)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:66:LEU:HD13	15	0.02
(1,1218)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:66:LEU:HD11	15	0.02
(1,1218)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:66:LEU:HD12	15	0.02
(1,1218)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:66:LEU:HD13	15	0.02
(1,1218)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:66:LEU:HD11	15	0.02
(1,1218)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:66:LEU:HD12	15	0.02
(1,1218)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:66:LEU:HD13	15	0.02
(1,1160)	1:A:49:ARG:HA	1:A:49:ARG:HD2	2	0.02
(1,115)	1:A:114:HIS:H	1:A:24:ILE:O	19	0.02
(1,1100)	1:A:45:ASN:HB2	1:A:47:ILE:H	13	0.02
(1,1069)	1:A:43:ASP:HB2	1:A:45:ASN:H	1	0.02
(1,1055)	1:A:41:CYS:HA	1:A:50:TRP:HZ2	11	0.02
(1,1034)	1:A:40:ALA:HA	1:A:46:ARG:HD2	1	0.02
(1,1033)	1:A:40:ALA:HA	1:A:46:ARG:HB3	1	0.02
(1,101)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:O	2	0.02
(1,101)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:O	12	0.02
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD11	1	0.02
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD12	1	0.02
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD13	1	0.02
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD11	5	0.02
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD12	5	0.02
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD13	5	0.02
(1,97)	1:A:100:ARG:H	1:A:111:GLU:O	3	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,968)	1:A:37:VAL:HG21	1:A:108:THR:HA	5	0.01
(1,968)	1:A:37:VAL:HG22	1:A:108:THR:HA	5	0.01
(1,968)	1:A:37:VAL:HG23	1:A:108:THR:HA	5	0.01
(1,940)	1:A:36:GLU:HG2	1:A:37:VAL:H	17	0.01
(1,929)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:39:SER:H	4	0.01
(1,906)	1:A:34:VAL:HG21	1:A:102:SER:HA	5	0.01
(1,906)	1:A:34:VAL:HG22	1:A:102:SER:HA	5	0.01
(1,906)	1:A:34:VAL:HG23	1:A:102:SER:HA	5	0.01
(1,906)	1:A:34:VAL:HG21	1:A:102:SER:HA	12	0.01
(1,906)	1:A:34:VAL:HG22	1:A:102:SER:HA	12	0.01
(1,906)	1:A:34:VAL:HG23	1:A:102:SER:HA	12	0.01
(1,906)	1:A:34:VAL:HG21	1:A:102:SER:HA	13	0.01
(1,906)	1:A:34:VAL:HG22	1:A:102:SER:HA	13	0.01
(1,906)	1:A:34:VAL:HG23	1:A:102:SER:HA	13	0.01
(1,906)	1:A:34:VAL:HG21	1:A:102:SER:HA	18	0.01
(1,906)	1:A:34:VAL:HG22	1:A:102:SER:HA	18	0.01
(1,906)	1:A:34:VAL:HG23	1:A:102:SER:HA	18	0.01
(1,902)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:80:PRO:HB2	5	0.01
(1,902)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:80:PRO:HB2	5	0.01
(1,902)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:80:PRO:HB2	5	0.01
(1,890)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HG3	13	0.01
(1,890)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HG3	13	0.01
(1,890)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HG3	13	0.01
(1,890)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HG3	14	0.01
(1,890)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HG3	14	0.01
(1,890)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HG3	14	0.01
(1,890)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HG3	19	0.01
(1,890)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HG3	19	0.01
(1,890)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HG3	19	0.01
(1,889)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HG2	2	0.01
(1,889)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HG2	2	0.01
(1,889)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HG2	2	0.01
(1,864)	1:A:33:PRO:HD2	1:A:36:GLU:HB2	20	0.01
(1,841)	1:A:32:ALA:HA	1:A:36:GLU:HB2	5	0.01
(1,81)	1:A:85:ILE:H	1:A:97:VAL:O	3	0.01
(1,756)	1:A:29:ARG:H	1:A:29:ARG:HD2	9	0.01
(1,752)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD11	6	0.01
(1,752)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD12	6	0.01
(1,752)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD13	6	0.01
(1,75)	1:A:82:ARG:H	1:A:78:GLU:O	9	0.01
(1,75)	1:A:82:ARG:H	1:A:78:GLU:O	10	0.01
(1,726)	1:A:27:ARG:HG3	1:A:28:GLN:H	14	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,726)	1:A:27:ARG:HG3	1:A:28:GLN:H	20	0.01
(1,721)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:111:GLU:HG2	3	0.01
(1,689)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:28:GLN:HE22	12	0.01
(1,689)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:28:GLN:HE22	12	0.01
(1,689)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:28:GLN:HE22	12	0.01
(1,66)	1:A:71:SER:N	1:A:88:VAL:O	11	0.01
(1,658)	1:A:26:ILE:H	1:A:112:LEU:HD21	11	0.01
(1,658)	1:A:26:ILE:H	1:A:112:LEU:HD22	11	0.01
(1,658)	1:A:26:ILE:H	1:A:112:LEU:HD23	11	0.01
(1,635)	1:A:25:ILE:HG12	1:A:113:GLU:HA	5	0.01
(1,632)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:113:GLU:HG2	8	0.01
(1,632)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:113:GLU:HG2	8	0.01
(1,632)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:113:GLU:HG2	8	0.01
(1,6)	1:A:12:GLY:N	1:A:23:SER:O	8	0.01
(1,559)	1:A:24:ILE:H	1:A:113:GLU:HG2	4	0.01
(1,55)	1:A:58:LEU:H	1:A:63:ASN:O	9	0.01
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG21	9	0.01
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG22	9	0.01
(1,523)	1:A:22:ARG:HB2	1:A:116:THR:HG23	9	0.01
(1,494)	1:A:20:GLU:H	1:A:20:GLU:HG2	17	0.01
(1,490)	1:A:19:GLY:HA2	1:A:117:THR:HG21	16	0.01
(1,490)	1:A:19:GLY:HA2	1:A:117:THR:HG22	16	0.01
(1,490)	1:A:19:GLY:HA2	1:A:117:THR:HG23	16	0.01
(1,49)	1:A:48:ASN:H	1:A:44:PRO:O	2	0.01
(1,487)	1:A:19:GLY:H	1:A:117:THR:HG21	15	0.01
(1,487)	1:A:19:GLY:H	1:A:117:THR:HG22	15	0.01
(1,487)	1:A:19:GLY:H	1:A:117:THR:HG23	15	0.01
(1,485)	1:A:18:ALA:HB1	1:A:117:THR:HG21	20	0.01
(1,485)	1:A:18:ALA:HB1	1:A:117:THR:HG22	20	0.01
(1,485)	1:A:18:ALA:HB1	1:A:117:THR:HG23	20	0.01
(1,485)	1:A:18:ALA:HB2	1:A:117:THR:HG21	20	0.01
(1,485)	1:A:18:ALA:HB2	1:A:117:THR:HG22	20	0.01
(1,485)	1:A:18:ALA:HB2	1:A:117:THR:HG23	20	0.01
(1,485)	1:A:18:ALA:HB3	1:A:117:THR:HG21	20	0.01
(1,485)	1:A:18:ALA:HB3	1:A:117:THR:HG22	20	0.01
(1,485)	1:A:18:ALA:HB3	1:A:117:THR:HG23	20	0.01
(1,47)	1:A:47:ILE:H	1:A:43:ASP:O	17	0.01
(1,446)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HG21	5	0.01
(1,446)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HG22	5	0.01
(1,446)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HG23	5	0.01
(1,446)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HG21	5	0.01
(1,446)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HG22	5	0.01



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,446)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HG23	5	0.01
(1,446)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HG21	5	0.01
(1,446)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HG22	5	0.01
(1,446)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HG23	5	0.01
(1,445)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HB	14	0.01
(1,445)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HB	14	0.01
(1,445)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HB	14	0.01
(1,445)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HB	16	0.01
(1,445)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HB	16	0.01
(1,445)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HB	16	0.01
(1,418)	1:A:15:THR:HA	1:A:20:GLU:HA	7	0.01
(1,41)	1:A:41:CYS:H	1:A:37:VAL:O	10	0.01
(1,389)	1:A:14:ARG:H	1:A:23:SER:H	6	0.01
(1,374)	1:A:13:ARG:HA	1:A:22:ARG:HA	13	0.01
(1,37)	1:A:39:SER:H	1:A:35:ASP:O	16	0.01
(1,367)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HD2	19	0.01
(1,340)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:177:LEU:HB2	14	0.01
(1,340)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:177:LEU:HB2	14	0.01
(1,340)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:177:LEU:HB2	14	0.01
(1,333)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:181:GLY:HA2	18	0.01
(1,333)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:181:GLY:HA2	18	0.01
(1,333)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:181:GLY:HA2	18	0.01
(1,324)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HB2	4	0.01
(1,324)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HB2	4	0.01
(1,324)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HB2	4	0.01
(1,324)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HB2	17	0.01
(1,324)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HB2	17	0.01
(1,324)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HB2	17	0.01
(1,324)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HB2	18	0.01
(1,324)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HB2	18	0.01
(1,324)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HB2	18	0.01
(1,323)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:12:GLY:H	3	0.01
(1,323)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:12:GLY:H	3	0.01
(1,323)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:12:GLY:H	3	0.01
(1,323)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:12:GLY:H	4	0.01
(1,323)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:12:GLY:H	4	0.01
(1,323)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:12:GLY:H	4	0.01
(1,319)	1:A:11:LEU:HG	1:A:178:VAL:HA	4	0.01
(1,30)	1:A:29:ARG:N	1:A:6:ALA:O	10	0.01
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD11	2	0.01
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD12	2	0.01
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD13	Continue	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2713)	1:A:181:GLY:H	1:A:182:SER:H	12	0.01
(1,2712)	1:A:181:GLY:H	1:A:181:GLY:HA2	16	0.01
(1,2711)	1:A:180:SER:HA	1:A:181:GLY:H	4	0.01
(1,2685)	1:A:177:LEU:HD21	1:A:180:SER:HB2	17	0.01
(1,2685)	1:A:177:LEU:HD22	1:A:180:SER:HB2	17	0.01
(1,2685)	1:A:177:LEU:HD23	1:A:180:SER:HB2	17	0.01
(1,2659)	1:A:176:ALA:HA	1:A:179:HIS:HB3	13	0.01
(1,2651)	1:A:175:ALA:HB1	1:A:179:HIS:HD2	2	0.01
(1,2651)	1:A:175:ALA:HB2	1:A:179:HIS:HD2	2	0.01
(1,2651)	1:A:175:ALA:HB3	1:A:179:HIS:HD2	2	0.01
(1,2644)	1:A:175:ALA:HA	1:A:178:VAL:HG21	17	0.01
(1,2644)	1:A:175:ALA:HA	1:A:178:VAL:HG22	17	0.01
(1,2644)	1:A:175:ALA:HA	1:A:178:VAL:HG23	17	0.01
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD21	3	0.01
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD22	3	0.01
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD23	3	0.01
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD21	7	0.01
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD22	7	0.01
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD23	7	0.01
(1,258)	1:A:9:ARG:HE	1:A:174:TRP:HE1	5	0.01
(1,2572)	1:A:168:GLN:HG2	1:A:168:GLN:HE21	1	0.01
(1,2572)	1:A:168:GLN:HG2	1:A:168:GLN:HE21	2	0.01
(1,2572)	1:A:168:GLN:HG2	1:A:168:GLN:HE21	18	0.01
(1,2557)	1:A:166:ILE:HG21	1:A:167:SER:HB2	9	0.01
(1,2557)	1:A:166:ILE:HG22	1:A:167:SER:HB2	9	0.01
(1,2557)	1:A:166:ILE:HG23	1:A:167:SER:HB2	9	0.01
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:169:GLU:HG2	13	0.01
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:169:GLU:HG2	13	0.01
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:169:GLU:HG2	13	0.01
(1,2529)	1:A:165:ARG:HB2	1:A:166:ILE:H	16	0.01
(1,2524)	1:A:165:ARG:HA	1:A:168:GLN:HB2	13	0.01
(1,2515)	1:A:164:MET:HE1	1:A:168:GLN:HE22	5	0.01
(1,2515)	1:A:164:MET:HE2	1:A:168:GLN:HE22	5	0.01
(1,2515)	1:A:164:MET:HE3	1:A:168:GLN:HE22	5	0.01
(1,2503)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HG21	12	0.01
(1,2503)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HG22	12	0.01
(1,2503)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HG23	12	0.01
(1,2503)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HG21	12	0.01
(1,2503)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HG22	12	0.01
(1,2503)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HG23	12	0.01
(1,2503)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HG21	12	0.01
(1,2503)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HG22	12	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2503)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HG23	12	0.01
(1,2471)	1:A:160:SER:HB2	1:A:162:GLU:H	5	0.01
(1,2456)	1:A:158:GLU:H	1:A:159:PRO:HD2	9	0.01
(1,2456)	1:A:158:GLU:H	1:A:159:PRO:HD2	11	0.01
(1,2446)	1:A:156:GLU:HA	1:A:157:PHE:H	2	0.01
(1,243)	1:A:9:ARG:H	1:A:177:LEU:HD11	13	0.01
(1,243)	1:A:9:ARG:H	1:A:177:LEU:HD12	13	0.01
(1,243)	1:A:9:ARG:H	1:A:177:LEU:HD13	13	0.01
(1,2416)	1:A:151:GLU:H	1:A:153:ALA:HB1	10	0.01
(1,2416)	1:A:151:GLU:H	1:A:153:ALA:HB2	10	0.01
(1,2416)	1:A:151:GLU:H	1:A:153:ALA:HB3	10	0.01
(1,24)	1:A:26:ILE:N	1:A:112:LEU:O	18	0.01
(1,2364)	1:A:142:GLY:H	1:A:144:LEU:HB2	7	0.01
(1,2352)	1:A:141:ARG:H	1:A:141:ARG:HD2	9	0.01
(1,2329)	1:A:139:PHE:HB3	1:A:144:LEU:HD11	18	0.01
(1,2329)	1:A:139:PHE:HB3	1:A:144:LEU:HD12	18	0.01
(1,2329)	1:A:139:PHE:HB3	1:A:144:LEU:HD13	18	0.01
(1,2315)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HA	5	0.01
(1,2315)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HA	5	0.01
(1,2315)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HA	5	0.01
(1,2312)	1:A:138:MET:HB2	1:A:144:LEU:HD11	9	0.01
(1,2312)	1:A:138:MET:HB2	1:A:144:LEU:HD12	9	0.01
(1,2312)	1:A:138:MET:HB2	1:A:144:LEU:HD13	9	0.01
(1,2232)	1:A:131:MET:HG2	1:A:132:ALA:H	15	0.01
(1,223)	1:A:8:GLU:H	1:A:26:ILE:HG21	12	0.01
(1,223)	1:A:8:GLU:H	1:A:26:ILE:HG22	12	0.01
(1,223)	1:A:8:GLU:H	1:A:26:ILE:HG23	12	0.01
(1,2221)	1:A:130:GLU:HG2	1:A:174:TRP:HZ2	15	0.01
(1,2219)	1:A:130:GLU:HG3	1:A:174:TRP:HE1	8	0.01
(1,2116)	1:A:123:VAL:HG11	1:A:175:ALA:HA	4	0.01
(1,2116)	1:A:123:VAL:HG12	1:A:175:ALA:HA	4	0.01
(1,2116)	1:A:123:VAL:HG13	1:A:175:ALA:HA	4	0.01
(1,2116)	1:A:123:VAL:HG11	1:A:175:ALA:HA	10	0.01
(1,2116)	1:A:123:VAL:HG12	1:A:175:ALA:HA	10	0.01
(1,2116)	1:A:123:VAL:HG13	1:A:175:ALA:HA	10	0.01
(1,2116)	1:A:123:VAL:HG11	1:A:175:ALA:HA	12	0.01
(1,2116)	1:A:123:VAL:HG12	1:A:175:ALA:HA	12	0.01
(1,2116)	1:A:123:VAL:HG13	1:A:175:ALA:HA	12	0.01
(1,2094)	1:A:122:LEU:HD21	1:A:125:VAL:HB	7	0.01
(1,2094)	1:A:122:LEU:HD22	1:A:125:VAL:HB	7	0.01
(1,2094)	1:A:122:LEU:HD23	1:A:125:VAL:HB	7	0.01
(1,207)	1:A:7:THR:HA	1:A:27:ARG:H	5	0.01



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2054)	1:A:120:GLN:HG2	1:A:121:MET:H	2	0.01
(1,2053)		1:A:120:GLN:HE21	20	0.01
(1,2030)	1:A:119:GLU:HA	1:A:122:LEU:HD11	9	0.01
(1,2030)	1:A:119:GLU:HA	1:A:122:LEU:HD12	9	0.01
(1,2030)	1:A:119:GLU:HA	1:A:122:LEU:HD13	9	0.01
(1,2030)	1:A:119:GLU:HA	1:A:122:LEU:HD11	19	0.01
(1,2030)	1:A:119:GLU:HA	1:A:122:LEU:HD12	19	0.01
(1,2030)	1:A:119:GLU:HA	1:A:122:LEU:HD13	19	0.01
(1,2019)	1:A:118:SER:HA	1:A:121:MET:H	7	0.01
(1,2016)	1:A:118:SER:H	1:A:121:MET:HB2	8	0.01
(1,1998)	1:A:116:THR:HG21	1:A:121:MET:H	16	0.01
(1,1998)	1:A:116:THR:HG22	1:A:121:MET:H	16	0.01
(1,1998)	1:A:116:THR:HG23	1:A:121:MET:H	16	0.01
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:133:LEU:HD11	8	0.01
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:133:LEU:HD12	8	0.01
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:133:LEU:HD13	8	0.01
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:133:LEU:HD11	8	0.01
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:133:LEU:HD12	8	0.01
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:133:LEU:HD13	8	0.01
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HD11	8	0.01
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HD12	8	0.01
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HD13	8	0.01
(1,191)	1:A:179:HIS:H	1:A:175:ALA:O	16	0.01
(1,1891)	1:A:108:THR:HG1	1:A:109:LEU:H	15	0.01
(1,1891)	1:A:108:THR:HG1	1:A:109:LEU:H	18	0.01
(1,1891)	1:A:108:THR:HG1	1:A:109:LEU:H	20	0.01
(1,1866)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD21	2	0.01
(1,1866)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD22	2	0.01
(1,1866)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD23	2	0.01
(1,186)	1:A:176:ALA:N	1:A:172:GLU:O	1	0.01
(1,1859)	1:A:104:GLU:HA	1:A:107:GLY:H	6	0.01
(1,1854)	1:A:104:GLU:H	1:A:108:THR:HG21	13	0.01
(1,1854)	1:A:104:GLU:H	1:A:108:THR:HG22	13	0.01
(1,1854)	1:A:104:GLU:H	1:A:108:THR:HG23	13	0.01
(1,1854)	1:A:104:GLU:H	1:A:108:THR:HG21	17	0.01
(1,1854)	1:A:104:GLU:H	1:A:108:THR:HG22	17	0.01
(1,1854)	1:A:104:GLU:H	1:A:108:THR:HG23	17	0.01
(1,185)	1:A:176:ALA:H	1:A:172:GLU:O	17	0.01
(1,1817)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:H	2	0.01
(1,1817)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:H	2	0.01
(1,1817)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:H	2	0.01
(1,1817)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:H	19	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2 Model		Violation (Å)
(1,1817)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:H	19	0.01
(1,1817)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:H	19	0.01
(1,1815)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:102:SER:HB2	1	0.01
(1,1815)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:102:SER:HB2	1	0.01
(1,1815)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:102:SER:HB2	1	0.01
(1,181)	1:A:174:TRP:H	1:A:170:ARG:O	17	0.01
(1,179)	1:A:173:ALA:H	1:A:169:GLU:O	3	0.01
(1,1718)	1:A:92:LYS:HG2	1:A:93:PRO:HD2	11	0.01
(1,1706)	1:A:92:LYS:H	1:A:92:LYS:HD2	11	0.01
(1,1697)	1:A:90:GLU:HA	1:A:91:GLY:H	8	0.01
(1,169)	1:A:168:GLN:H	1:A:164:MET:O	13	0.01
(1,1685)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:92:LYS:H	6	0.01
(1,1684)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:90:GLU:HG2	12	0.01
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE1	16	0.01
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE2	16	0.01
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE3	16	0.01
(1,165)	1:A:166:ILE:H	1:A:162:GLU:O	16	0.01
(1,165)	1:A:166:ILE:H	1:A:162:GLU:O	18	0.01
(1,163)	1:A:165:ARG:H	1:A:161:PRO:O	13	0.01
(1,16)	1:A:22:ARG:N	1:A:116:THR:O	1	0.01
(1,159)	1:A:141:ARG:H	1:A:137:GLY:O	4	0.01
(1,1575)	1:A:83:LEU:H	1:A:99:LEU:HB2	13	0.01
(1,1564)	1:A:82:ARG:HB2	1:A:99:LEU:H	4	0.01
(1,1563)	1:A:82:ARG:HA	1:A:82:ARG:HD2	9	0.01
(1,151)	1:A:137:GLY:H	1:A:133:LEU:O	7	0.01
(1,151)	1:A:137:GLY:H	1:A:133:LEU:O	20	0.01
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	10	0.01
(1,145)	1:A:134:ASP:H	1:A:130:GLU:O	18	0.01
(1,1443)	1:A:71:SER:H	1:A:87:TRP:HA	4	0.01
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB1	1:A:89:TYR:HD1	5	0.01
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB2	1:A:89:TYR:HD1	5	0.01
(1,1440)	1:A:70:ALA:HB3	1:A:89:TYR:HD1	5	0.01
(1,1426)	1:A:70:ALA:H	1:A:89:TYR:HD1	18	0.01
(1,1416)	1:A:69:ASN:H	1:A:69:ASN:HB2	8	0.01
(1,1412)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:67:GLN:HE21	14	0.01
(1,141)	1:A:132:ALA:H	1:A:128:GLY:O	4	0.01
(1,141)	1:A:132:ALA:H	1:A:128:GLY:O	19	0.01
(1,139)	1:A:131:MET:H	1:A:127:VAL:O	7	0.01
(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	1	0.01
(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	8	0.01
(1,1367)	1:A:64:PHE:HE1	1:A:85:ILE:HB	15	0.01
(1,1349)	1:A:63:ASN:HB2	1:A:64:PHE:H	4	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1348)	1:A:63:ASN:HB2	1:A:63:ASN:HD21	2	0.01
(1,1348)	1:A:63:ASN:HB2	1:A:63:ASN:HD21	12	0.01
(1,1342)	1:A:63:ASN:HA	1:A:73:ASP:HA	8	0.01
(1,1342)	1:A:63:ASN:HA	1:A:73:ASP:HA	10	0.01
(1,1330)	1:A:60:GLU:HG2	1:A:77:CYS:H	17	0.01
(1,125)	1:A:124:GLU:H	1:A:120:GLN:O	2	0.01
(1,125)	1:A:124:GLU:H	1:A:120:GLN:O	8	0.01
(1,1245)	1:A:53:GLU:HG2	1:A:54:PRO:HA	2	0.01
(1,124)	1:A:123:VAL:N	1:A:119:GLU:O	18	0.01
(1,1239)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:68:GLY:H	1	0.01
(1,1239)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:68:GLY:H	1	0.01
(1,1239)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:68:GLY:H	1	0.01
(1,1239)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:68:GLY:H	7	0.01
(1,1239)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:68:GLY:H	7	0.01
(1,1239)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:68:GLY:H	7	0.01
(1,1236)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:67:GLN:H	10	0.01
(1,1236)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:67:GLN:H	10	0.01
(1,1236)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:67:GLN:H	10	0.01
(1,1236)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:67:GLN:H	15	0.01
(1,1236)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:67:GLN:H	15	0.01
(1,1236)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:67:GLN:H	15	0.01
(1,1226)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:69:ASN:HD21	18	0.01
(1,1226)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:69:ASN:HD21	18	0.01
(1,1226)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:69:ASN:HD21	18	0.01
(1,121)	1:A:122:LEU:H	1:A:118:SER:O	11	0.01
(1,1181)	1:A:50:TRP:HH2	1:A:133:LEU:HD21	3	0.01
(1,1181)	1:A:50:TRP:HH2	1:A:133:LEU:HD22	3	0.01
(1,1181)	1:A:50:TRP:HH2	1:A:133:LEU:HD23	3	0.01
(1,1180)	1:A:50:TRP:HH2	1:A:133:LEU:HD11	14	0.01
(1,1180)	1:A:50:TRP:HH2	1:A:133:LEU:HD12	14	0.01
(1,1180)	1:A:50:TRP:HH2	1:A:133:LEU:HD13	14	0.01
(1,115)	1:A:114:HIS:H	1:A:24:ILE:O	11	0.01
(1,1147)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:54:PRO:HD3	9	0.01
(1,1147)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:54:PRO:HD3	9	0.01
(1,1147)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:54:PRO:HD3	9	0.01
(1,1109)	1:A:46:ARG:HA	1:A:49:ARG:HD2	16	0.01
(1,1039)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:139:PHE:HZ	11	0.01
(1,1039)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:139:PHE:HZ	11	0.01
(1,1039)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:139:PHE:HZ	11	0.01
(1,1037)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:136:LEU:HD11	11	0.01
(1,1037)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:136:LEU:HD12	11	0.01
(1,1037)	1:A:40:ALA:HB1	1:A:136:LEU:HD13	11	0.01



Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1037)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:136:LEU:HD11	11	0.01
(1,1037)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:136:LEU:HD12	11	0.01
(1,1037)	1:A:40:ALA:HB2	1:A:136:LEU:HD13	11	0.01
(1,1037)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:136:LEU:HD11	11	0.01
(1,1037)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:136:LEU:HD12	11	0.01
(1,1037)	1:A:40:ALA:HB3	1:A:136:LEU:HD13	11	0.01
(1,1033)	1:A:40:ALA:HA	1:A:46:ARG:HB3	5	0.01
(1,103)	1:A:104:GLU:H	1:A:107:GLY:O	8	0.01
(1,102)	1:A:102:SER:N	1:A:109:LEU:O	9	0.01
(1,101)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:O	10	0.01
(1,1009)	1:A:38:TRP:HH2	1:A:83:LEU:HD21	9	0.01
(1,1009)	1:A:38:TRP:HH2	1:A:83:LEU:HD22	9	0.01
(1,1009)	1:A:38:TRP:HH2	1:A:83:LEU:HD23	9	0.01



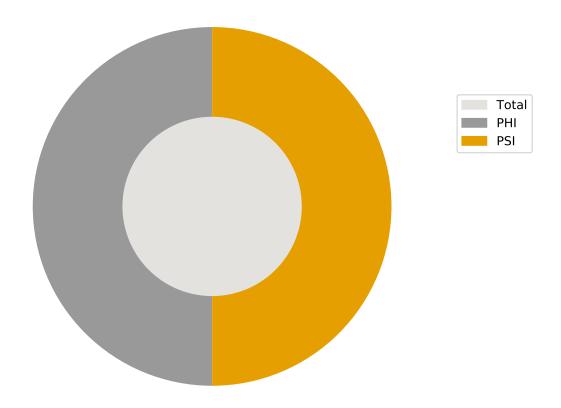
# 9 Dihedral angle restraints analysis

## 9.1 Dihedral angle restraints summary

Angle name	Count	%
PHI	111	50.0
PSI	111	50.0
Total	222	100.0

#### 9.1.1 Pie chart : Dihedral angle restraints

There are 0 unmapped restraints



# 9.2 Dihedral angle violations

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

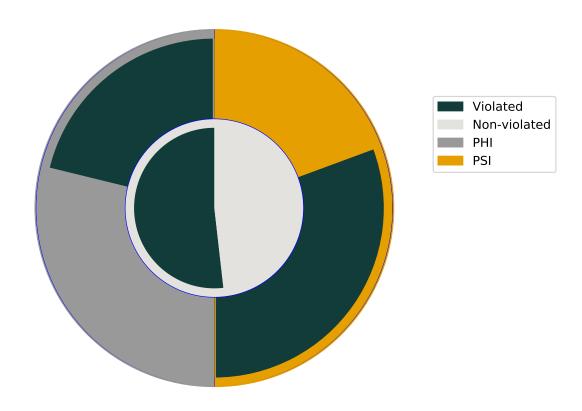
Angle name	Count	$\%^1$	$\%^2$
PHI	47	42.3	40.9
PSI	68	61.3	59.1



Angle name	Count	$\%^1$	$\%^2$
Total	115	51.8	100.0

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

#### 9.2.1 Pie chart : Dihedral angle violations



# 9.3 Consistent dihedral angle violations

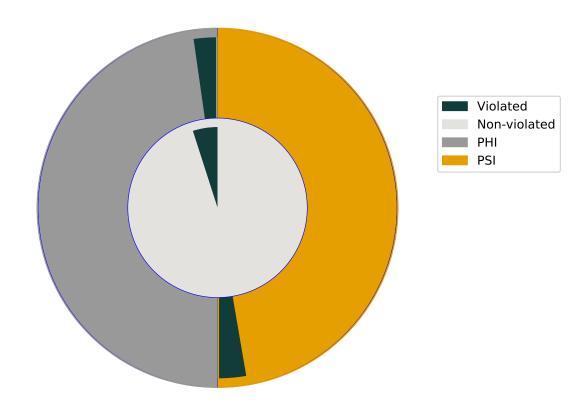
The following table provides the summary of consistently violated restraints. Restraints that are violated all models are counted as violated.

Angle name	Count	$\%^1$	$\%^2$
PHI	5	4.5	45.5
PSI	6	5.4	54.5
Total	11	5.0	100.0

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



#### 9.3.1 Pie chart: Consistent dihedral angle violations



## 9.4 Residual dihedral angle violations

Violation are counted in different bin sizes and listed below

Range $(\circ)$	No. of violated restraints per model	$\text{Max violation } (\circ)$
0.0-5.0	22.3	4.97
5.0-10.0	2.5	9.97
10.0-20.0	2.8	19.99
20.0-40.0	7.5	39.96
40.0-80.0	2.5	68.24
80.0<	None	None

# 9.5 Dihedral angle violations in the ensemble

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

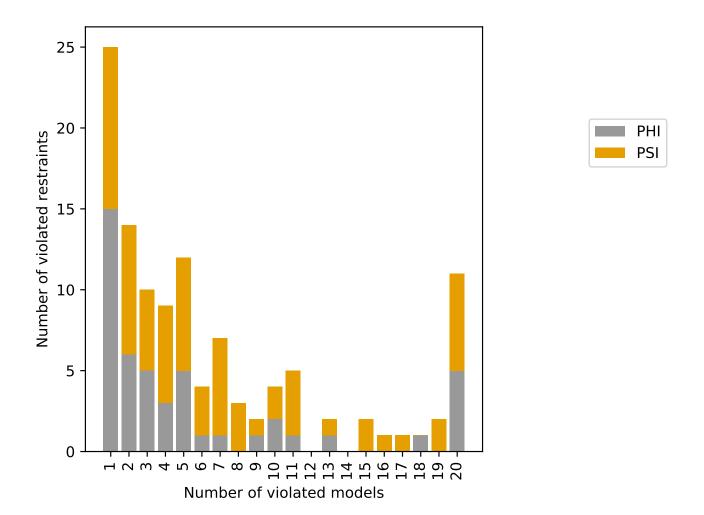
No.	of vio	lated restraints	No. of violated models
PHI	PSI	Total	No. of violated models
15	10	25	1



		plated restraints	No. of violated models
PHI	PSI	Total	No. of violated models
6	8	14	2
5	5	10	3
3	6	9	4
5	7	12	5
1	3	4	6
1	6	7	7
0	3	3	8
1	1	2	9
2	2	4	10
1	4	5	11
0	0	0	12
1	1	2	13
0	0	0	14
0	2	2	15
0	1	1	16
0	1	1	17
1	0	1	18
0	2	2	19
5	6	11	20



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



## 9.6 Violations in each model

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

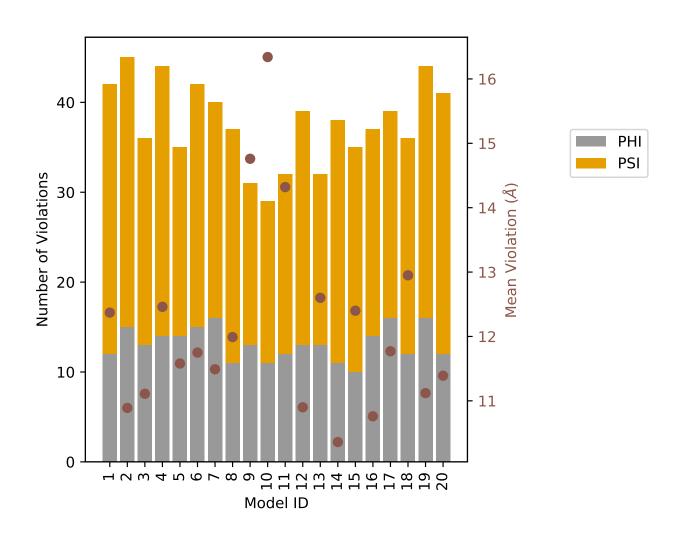
Model ID	No.	of vic	olations	Mean (Å)	Max (Å)	
Model 1D	PHI	PSI	Total	Mean (A)	Max (A)	
1	12	30	42	12.37	68.24	
2	15	30	45	10.89	57.9	
3	13	23	36	11.11	62.8	
4	14	30	44	12.46	67.55	
5	14	21	35	11.58	57.42	
6	15	27	42	11.75	67.23	
7	16	24	40	11.49	64.29	
8	11	26	37	11.99	54.37	
9	13	18	31	14.76	54.96	



Continued from previous page...

Model ID	No.	of vio	olations	Moon (Å)	Max (Å)	
Wiodei 1D	PHI	PSI	Total	Mean (Å)	Max (A)	
10	11	18	29	16.34	60.73	
11	12	20	32	14.32	47.63	
12	13	26	39	10.9	46.96	
13	13	19	32	12.6	58.02	
14	11	27	38	10.36	53.32	
15	10	25	35	12.4	58.58	
16	14	23	37	10.76	62.7	
17	16	23	39	11.77	55.88	
18	12	24	36	12.95	56.62	
19	16	28	44	11.12	63.17	
20	12	29	41	11.39	54.86	

### 9.6.1 Bar graph: Violations in each model

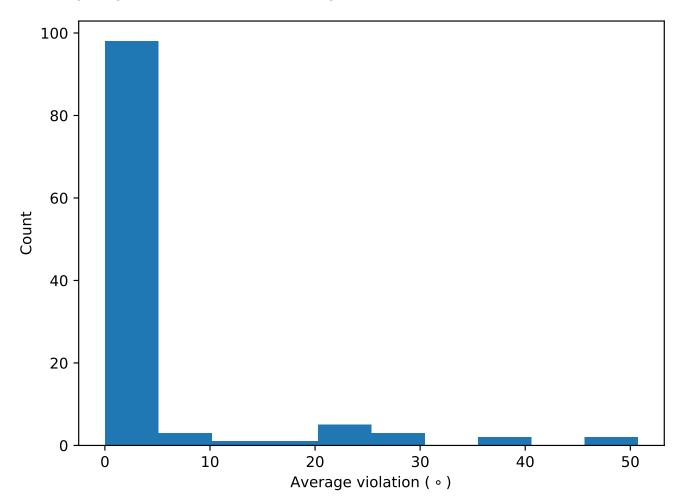




## 9.7 Most violated dihedral angle restraints

#### 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 ( ° )
(1,102)	1:A:92:LYS:N	1:A:92:LYS:CA	1:A:92:LYS:C	1:A:93:PRO:N	20	35.62	57.5
(1,124)	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	1:A:108:THR:N	15	17.98	49.18
(1,12)	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	1:A:13:ARG:N	19	20.99	45.42
(1,70)	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	1:A:63:ASN:N	16	21.27	40.2
(1,20)	1:A:16:ILE:N	1:A:16:ILE:CA	1:A:16:ILE:C	1:A:17:PRO:N	20	29.28	39.05
(1,116)	1:A:102:SER:N	1:A:102:SER:CA	1:A:102:SER:C	1:A:103:GLU:N	20	20.32	37.2
(1,94)	1:A:85:ILE:N	1:A:85:ILE:CA	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	20	26.45	34.27
(1,142)	1:A:116:THR:N	1:A:116:THR:CA	1:A:116:THR:C	1:A:117:THR:N	20	29.22	31.8
(1,96)	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	17	14.5	27.94
(1,8)	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	11	7.59	18.45



	ed from previous p		A 4	A 1	N. C. 1.1.	<b>N</b> ( )	TMT. ( )
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean ( o )	Max (∘)
(1,122)	1:A:105:GLY:N	1:A:105:GLY:CA	1:A:105:GLY:C	1:A:106:ASP:N	10	3.01	15.16
(1,4)	1:A:8:GLU:N	1:A:8:GLU:CA	1:A:8:GLU:C	1:A:9:ARG:N	8	3.9	9.7
(1,36)	1:A:27:ARG:N	1:A:27:ARG:CA	1:A:27:ARG:C	1:A:28:GLN:N	6	3.76	7.22
(1,104)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:VAL:N	8	3.71	7.12
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	19	3.37	7.0
(1,140)	1:A:115:ALA:N	1:A:115:ALA:CA	1:A:115:ALA:C	1:A:116:THR:N	7	3.5	6.21
(1,38)	1:A:28:GLN:N	1:A:28:GLN:CA	1:A:28:GLN:C	1:A:29:ARG:N	5	4.07	6.2
(1,110)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:ARG:N	3	3.36	5.84
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	20	3.81	5.62
(1,88)	1:A:82:ARG:N	1:A:82:ARG:CA	1:A:82:ARG:C	1:A:83:LEU:N	10	2.37	5.49
(1,30)	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	1:A:25:ILE:N	11	1.44	5.4
(1,40)	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	13	2.81	5.34
(1,120)	1:A:104:GLU:N	1:A:104:GLU:CA	1:A:104:GLU:C	1:A:105:GLY:N	3	4.22	5.27
(1,136)	1:A:113:GLU:N	1:A:113:GLU:CA	1:A:113:GLU:C	1:A:114:HIS:N	5	2.54	4.82
(1,138)	1:A:114:HIS:N	1:A:114:HIS:CA	1:A:114:HIS:C	1:A:115:ALA:N	11	2.08	4.6
(1,24)	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1:A:21:ALA:N	4	2.18	4.6
(1,130)	1:A:110:LEU:N	1:A:110:LEU:CA	1:A:110:LEU:C	1:A:111:GLU:N	5	1.96	4.37
(1,92)	1:A:84:THR:N	1:A:84:THR:CA	1:A:84:THR:C	1:A:85:ILE:N	5	2.63	4.33
(1,16)	1:A:14:ARG:N	1:A:14:ARG:CA	1:A:14:ARG:C	1:A:15:THR:N	7	3.02	4.17
(1,26)	1:A:21:ALA:N	1:A:21:ALA:CA	1:A:21:ALA:C	1:A:22:ARG:N	8	2.08	3.87
(1,108)	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	1:A:99:LEU:N	7	1.87	3.83
(1,10)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	5	1.96	3.76
(1,164)	1:A:128:GLY:N	1:A:128:GLY:CA	1:A:128:GLY:C	1:A:129:TRP:N	9	1.68	3.7
(1,48)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:VAL:N	11	1.49	3.56
(1,174)	1:A:133:LEU:N	1:A:133:LEU:CA	1:A:133:LEU:C	1:A:134:ASP:N	5	1.7	3.52
(1,28)	1:A:22:ARG:N	1:A:22:ARG:CA	1:A:22:ARG:C	1:A:23:SER:N	4	2.4	3.48
(1,100)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:TYR:N	15	1.82	3.22
(1,210)	1:A:172:GLU:N	1:A:172:GLU:CA	1:A:172:GLU:C	1:A:173:ALA:N	2	1.85	3.18
(1,188)	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	1:A:141:ARG:N	4	1.62	3.16
(1,134)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:GLU:N	4	1.59	3.15
(1,214)	1:A:174:TRP:N	1:A:174:TRP:CA	1:A:174:TRP:C	1:A:175:ALA:N	5	1.16	3.14
(1,82)	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	1:A:77:CYS:N	7	0.94	2.96
(1,80)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:ARG:N	4	1.55	2.68
(1,90)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:THR:N	7	1.55	2.61
(1,2)	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:GLU:N	1	2.52	2.52
(1,190)	1:A:162:GLU:N	1:A:162:GLU:CA	1:A:162:GLU:C	1:A:163:MET:N	6	0.77	2.5
(1,208)	1:A:171:GLY:N	1:A:171:GLY:CA	1:A:171:GLY:C	1:A:172:GLU:N	6	0.95	2.47
(1,98)	1:A:87:TRP:N	1:A:87:TRP:CA	1:A:87:TRP:C	1:A:88:VAL:N	4	1.59	2.45
(1,14)	1:A:13:ARG:N	1:A:13:ARG:CA	1:A:13:ARG:C	1:A:14:ARG:N	1	2.41	2.41
(1,58)	1:A:45:ASN:N	1:A:45:ASN:CA	1:A:45:ASN:C	1:A:46:ARG:N	2	1.98	2.41
(1,216)	1:A:175:ALA:N	1:A:175:ALA:CA	1:A:175:ALA:C	1:A:176:ALA:N	2	1.79	2.31
(1,210) $(1,126)$	1:A:108:THR:N	1:A:108:THR:CA	1:A:108:THR:C	1:A:109:LEU:N	2	1.44	2.25
(1,176)	1:A:134:ASP:N	1:A:134:ASP:CA	1:A:134:ASP:C	1:A:135:PHE:N	1	2.14	2.14
(1,110) $(1,106)$	1:A:97:VAL:N	1:A:97:VAL:CA	1:A:97:VAL:C	1:A:98:GLU:N	7	1.29	2.14
(1,78)	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1:A:75:LEU:N	1	1.94	1.94
(1,128)	1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CA	1:A:109:LEU:C	1:A:110:LEU:N	1	1.83	1.83
(1,120) $(1,202)$	1:A:168:GLN:N	1:A:168:GLN:CA	1:A:168:GLN:C	1:A:169:GLU:N	1	1.8	1.8
(1,202) $(1,84)$	1:A:77:CYS:N	1:A:77:CYS:CA	1:A:77:CYS:C	1:A:78:GLU:N	2	1.63	1.8
(1,32)	1:A:25:ILE:N	1:A:25:ILE:CA	1:A:25:ILE:C	1:A:26:ILE:N	2	1.03	1.75
(1,60)	1:A:46:ARG:N	1:A:46:ARG:CA	1:A:46:ARG:C	1:A:47:ILE:N	2	0.93	1.74
(1,00) $(1,172)$	1:A:40:ARG:N 1:A:132:ALA:N	1:A:40:ARG:CA 1:A:132:ALA:CA	1:A:40:AKG:C 1:A:132:ALA:C	1:A:47:ILE:N 1:A:133:LEU:N	3	1.05	1.74
(1,112)	1.A.152.ALA.IN	1.A.152.ALA.UA	1.A.132.ALA.U	1.A.155:LEU:N	ა	Continued on	



	ed from previous po		A	A	N.C. 1.1	<b>3</b> 4 ( )	7 / \
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean ( o )	Max (∘)
(1,72)	1:A:63:ASN:N	1:A:63:ASN:CA	1:A:63:ASN:C	1:A:64:PHE:N	3	0.61	1.0
(1,204)	1:A:169:GLU:N	1:A:169:GLU:CA	1:A:169:GLU:C	1:A:170:ARG:N	1	0.73	0.73
(1,148)	1:A:120:GLN:N	1:A:120:GLN:CA	1:A:120:GLN:C	1:A:121:MET:N	3	0.44	0.7
(1,74)	1:A:64:PHE:N	1:A:64:PHE:CA	1:A:64:PHE:C	1:A:65:ALA:N	2	0.42	0.56
(1,180)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	1:A:137:GLY:N	1	0.44	0.44
(1,178)	1:A:135:PHE:N	1:A:135:PHE:CA	1:A:135:PHE:C	1:A:136:LEU:N	1	0.43	0.43
(1,66)	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	1	0.04	0.04
(1,41)	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	1:A:30:TYR:CA	1:A:30:TYR:C	20	38.33	68.24
(1,11)	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	20	48.69	67.55
(1,97)	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	1:A:87:TRP:CA	1:A:87:TRP:C	20	50.7	63.17
(1,81)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	20	25.34	40.23
(1,7)	1:A:9:ARG:C	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	20	23.18	37.98
(1,95)	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	10	9.76	23.41
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	18	5.69	11.1
(1,59)	1:A:45:ASN:C	1:A:46:ARG:N	1:A:46:ARG:CA	1:A:46:ARG:C	5	4.94	11.05
(1,203)	1:A:168:GLN:C	1:A:169:GLU:N	1:A:169:GLU:CA	1:A:169:GLU:C	9	4.38	7.33
(1,65)	1:A:51:PHE:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	13	3.15	5.92
(1,73)	1:A:63:ASN:C	1:A:64:PHE:N	1:A:64:PHE:CA	1:A:64:PHE:C	5	2.72	5.38
(1,173)	1:A:132:ALA:C	1:A:133:LEU:N	1:A:133:LEU:CA	1:A:133:LEU:C	4	2.63	5.01
(1,75)	1:A:64:PHE:C	1:A:65:ALA:N	1:A:65:ALA:CA	1:A:65:ALA:C	10	2.77	4.86
(1,39)	1:A:28:GLN:C	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	5	3.16	4.54
(1,201)	1:A:167:SER:C	1:A:168:GLN:N	1:A:168:GLN:CA	1:A:168:GLN:C	5	2.89	4.3
(1,77)	1:A:73:ASP:C	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	6	2.39	4.2
(1,13)	1:A:12:GLY:C	1:A:13:ARG:N	1:A:13:ARG:CA	1:A:13:ARG:C	3	2.36	3.8
(1,29)	1:A:23:SER:C	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	11	1.66	3.54
(1,37)	1:A:27:ARG:C	1:A:28:GLN:N	1:A:28:GLN:CA	1:A:28:GLN:C	5	1.67	3.0
(1,5)	1:A:8:GLU:C	1:A:9:ARG:N	1:A:9:ARG:CA	1:A:9:ARG:C	2	1.94	2.61
(1,109)	1:A:98:GLU:C	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1	2.52	2.52
(1,1)	1:A:6:ALA:C	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	3	1.22	2.31
(1,33)	1:A:25:ILE:C	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	4	0.99	2.24
(1,107)	1:A:97:VAL:C	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	4	1.49	2.24
(1,133)	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1	2.04	2.04
(1,113)	1:A:100:ARG:C	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	1	1.92	1.92
(1,129)	1:A:109:LEU:C	1:A:110:LEU:N	1:A:110:LEU:CA	1:A:110:LEU:C	2	1.4	1.82
(1,17)	1:A:14:ARG:C	1:A:15:THR:N	1:A:15:THR:CA	1:A:15:THR:C	1	1.77	1.77
(1,165)	1:A:128:GLY:C	1:A:129:TRP:N	1:A:129:TRP:CA	1:A:129:TRP:C	2	1.46	1.65
(1,135)	1:A:112:LEU:C	1:A:113:GLU:N	1:A:113:GLU:CA	1:A:113:GLU:C	3	0.95	1.6
(1,127)	1:A:108:THR:C	1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CA	1:A:109:LEU:C	7	0.9	1.26
(1,105)	1:A:96:GLU:C	1:A:97:VAL:N	1:A:97:VAL:CA	1:A:97:VAL:C	3	1.0	1.25
(1,123)	1:A:106:ASP:C	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	2	1.04	1.24
(1,19)	1:A:15:THR:C	1:A:16:ILE:N	1:A:16:ILE:CA	1:A:16:ILE:C	2	0.74	1.2
(1,85)	1:A:77:CYS:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	2	1.0	1.08
(1,79)	1:A:74:ILE:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1	0.85	0.85
(1,15)	1:A:13:ARG:C	1:A:14:ARG:N	1:A:14:ARG:CA	1:A:14:ARG:C	3	0.51	0.83
(1,35)	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	1:A:27:ARG:CA	1:A:27:ARG:C	1	0.66	0.66
(1,103)	1:A:95:SER:C	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1	0.6	0.6
(1,221)	1:A:177:LEU:C	1:A:178:VAL:N	1:A:178:VAL:CA	1:A:178:VAL:C	1	0.56	0.56
(1,83)	1:A:76:ARG:C	1:A:77:CYS:N	1:A:77:CYS:CA	1:A:77:CYS:C	1	0.47	0.47
(1,43)	1:A:33:PRO:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	1	0.35	0.35
(1,161)	1:A:126:GLY:C	1:A:127:VAL:N	1:A:127:VAL:CA	1:A:127:VAL:C	1	0.33	0.33
(1,91)	1:A:83:LEU:C	1:A:84:THR:N	1:A:84:THR:CA	1:A:84:THR:C	1	0.31	0.31
(+,0+)						Continued on	

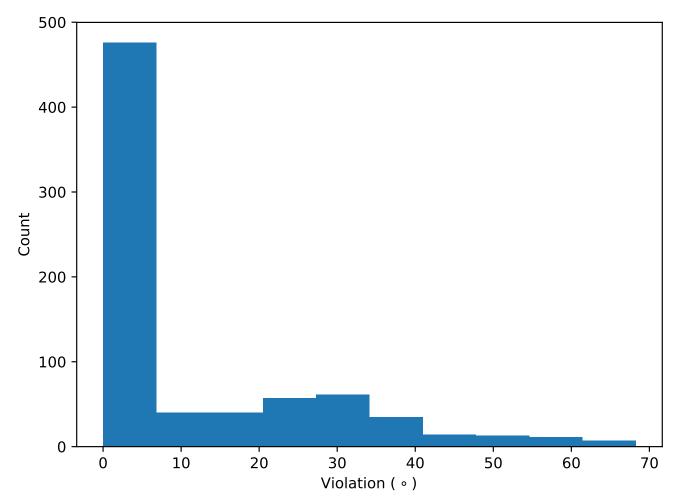


Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean ( o )	Max (∘)
(1,149)	1:A:120:GLN:C	1:A:121:MET:N	1:A:121:MET:CA	1:A:121:MET:C	1	0.26	0.26
(1,213)	1:A:173:ALA:C	1:A:174:TRP:N	1:A:174:TRP:CA	1:A:174:TRP:C	1	0.14	0.14
(1,89)	1:A:82:ARG:C	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1	0.09	0.09

# 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 $(\circ)$
(1,41)	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	1:A:30:TYR:CA	1:A:30:TYR:C	1	68.24
(1,11)	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	4	67.55
(1,11)	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	6	67.23



	d from previous pe	*	A + 9	A + 4	N/L1 - 1	<b>17:-1-4:</b> ( - )
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,41)	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	1:A:30:TYR:CA	1:A:30:TYR:C	7	64.29
(1,97)	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	1:A:87:TRP:CA	1:A:87:TRP:C	19	63.17
(1,97)	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	1:A:87:TRP:CA	1:A:87:TRP:C	3	62.8
(1,97)	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	1:A:87:TRP:CA	1:A:87:TRP:C	16	62.7
(1,97)	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	1:A:87:TRP:CA	1:A:87:TRP:C	10	60.73
(1,97)	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	1:A:87:TRP:CA	1:A:87:TRP:C	1	59.84
(1,11)	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	15	58.58
(1,97)	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	1:A:87:TRP:CA	1:A:87:TRP:C	13	58.02
(1,97)	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	1:A:87:TRP:CA	1:A:87:TRP:C	2	57.9
(1,102)	1:A:92:LYS:N	1:A:92:LYS:CA	1:A:92:LYS:C	1:A:93:PRO:N	10	57.5
(1,97)	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	1:A:87:TRP:CA	1:A:87:TRP:C	5	57.42
(1,11)	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	18	56.62
(1,97)	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	1:A:87:TRP:CA	1:A:87:TRP:C	17	55.88
(1,102)	1:A:92:LYS:N	1:A:92:LYS:CA	1:A:92:LYS:C	1:A:93:PRO:N	9	54.96
(1,11)	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	20	54.86
(1,102)	1:A:92:LYS:N	1:A:92:LYS:CA	1:A:92:LYS:C	1:A:93:PRO:N	8	54.37
(1,11)	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	14	53.32
(1,11)	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	19	52.57
(1,97)	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	1:A:87:TRP:CA	1:A:87:TRP:C	15	52.35
(1,97)	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	1:A:87:TRP:CA	1:A:87:TRP:C	4	52.02
(1,11)	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	5	51.47
(1,11)	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	10	50.98
(1,11)	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	17	50.37
(1,97)	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	1:A:87:TRP:CA	1:A:87:TRP:C	8	49.87
(1,11)	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	7	49.83
(1,124)	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	1:A:108:THR:N	4	49.18
(1,97)	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	1:A:87:TRP:CA	1:A:87:TRP:C	9	48.75
(1,97)	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	1:A:87:TRP:CA	1:A:87:TRP:C	20	48.61
(1,102)	1:A:92:LYS:N	1:A:92:LYS:CA	1:A:92:LYS:C	1:A:93:PRO:N	11	47.63
(1,11)	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	2	47.2
(1,97)	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	1:A:87:TRP:CA	1:A:87:TRP:C	12	46.96
(1,11)	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	12	46.59
(1,12)	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	1:A:13:ARG:N	4	45.42
(1,124)	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	1:A:108:THR:N	2	45.21
(1,41)	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	1:A:30:TYR:CA	1:A:30:TYR:C	20	45.05
(1,11)	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	11	44.09
(1,11)	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	8	43.84
(1,11)	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	3	43.53
(1,41)	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	1:A:30:TYR:CA	1:A:30:TYR:C	10	43.0
(1,41)	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	1:A:30:TYR:CA	1:A:30:TYR:C	13	41.77
(1,11)	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	16	41.17
(1,102)	1:A:92:LYS:N	1:A:92:LYS:CA	1:A:92:LYS:C	1:A:93:PRO:N	15	41.12
(1,102)	1:A:92:LYS:N	1:A:92:LYS:CA	1:A:92:LYS:C	1:A:93:PRO:N	2	40.71
(1,41)	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	1:A:30:TYR:CA	1:A:30:TYR:C	5	40.4
(1,81)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	1	40.23
(1,12)	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	1:A:13:ARG:N	17	40.23
(1,70)	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	1:A:63:ASN:N	11	40.2
(1,102)	1:A:92:LYS:N	1:A:92:LYS:CA	1:A:92:LYS:C	1:A:93:PRO:N	12	40.04
(1,97)	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	1:A:87:TRP:CA	1:A:87:TRP:C	11	39.96
· · /	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	1:A:87:TRP:CA	1:A:87:TRP:C	7	39.58
(1,97)	1.71.00.0110.0	1.71.01.1101.11	1.71.01.1101.071	1.11.01.1101.0	•	00.00



	ed from previous p	*				
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ ( \circ )$
(1,20)	1:A:16:ILE:N	1:A:16:ILE:CA	1:A:16:ILE:C	1:A:17:PRO:N	11	39.05
(1,41)	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	1:A:30:TYR:CA	1:A:30:TYR:C	16	38.81
(1,11)	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	9	38.76
(1,97)	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	1:A:87:TRP:CA	1:A:87:TRP:C	6	38.31
(1,41)	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	1:A:30:TYR:CA	1:A:30:TYR:C	6	38.28
(1,7)	1:A:9:ARG:C	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	1	37.98
(1,12)	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	1:A:13:ARG:N	8	37.45
(1,81)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	14	37.3
(1,116)	1:A:102:SER:N	1:A:102:SER:CA	1:A:102:SER:C	1:A:103:GLU:N	6	37.2
(1,81)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	6	37.15
(1,81)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	10	36.89
(1,97)	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	1:A:87:TRP:CA	1:A:87:TRP:C	18	36.38
(1,20)	1:A:16:ILE:N	1:A:16:ILE:CA	1:A:16:ILE:C	1:A:17:PRO:N	9	35.99
(1,41)	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	1:A:30:TYR:CA	1:A:30:TYR:C	15	35.9
(1,81)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	9	35.85
(1,116)	1:A:102:SER:N	1:A:102:SER:CA	1:A:102:SER:C	1:A:103:GLU:N	7	35.84
(1,41)	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	1:A:30:TYR:CA	1:A:30:TYR:C	4	35.68
(1,41)	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	1:A:30:TYR:CA	1:A:30:TYR:C	11	35.62
(1,81)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	18	35.58
(1,102)	1:A:92:LYS:N	1:A:92:LYS:CA	1:A:92:LYS:C	1:A:93:PRO:N	3	35.46
(1,116)	1:A:102:SER:N	1:A:102:SER:CA	1:A:102:SER:C	1:A:103:GLU:N	20	35.42
(1,102)	1:A:92:LYS:N	1:A:92:LYS:CA	1:A:92:LYS:C	1:A:93:PRO:N	19	35.15
(1,12)	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	1:A:13:ARG:N	20	34.89
(1,41)	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	1:A:30:TYR:CA	1:A:30:TYR:C	19	34.79
(1,41)	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	1:A:30:TYR:CA	1:A:30:TYR:C	14	34.49
(1,94)	1:A:85:ILE:N	1:A:85:ILE:CA	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	13	34.27
(1,41)	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	1:A:30:TYR:CA	1:A:30:TYR:C	3	34.05
(1,94)	1:A:85:ILE:N	1:A:85:ILE:CA	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	8	34.04
(1,94)	1:A:85:ILE:N	1:A:85:ILE:CA	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	17	33.72
(1,102)	1:A:92:LYS:N	1:A:92:LYS:CA	1:A:92:LYS:C	1:A:93:PRO:N	17	33.53
(1,41)	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	1:A:30:TYR:CA	1:A:30:TYR:C	2	33.52
(1,94)	1:A:85:ILE:N	1:A:85:ILE:CA	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	4	33.5
(1,94)	1:A:85:ILE:N	1:A:85:ILE:CA	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	5	33.41
(1,94)	1:A:85:ILE:N	1:A:85:ILE:CA	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	1	33.39
(1,94)	1:A:85:ILE:N	1:A:85:ILE:CA	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	3	33.14
(1,116)	1:A:102:SER:N	1:A:102:SER:CA	1:A:102:SER:C	1:A:103:GLU:N	9	32.73
(1,11)	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	13	32.72
(1,70)	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	1:A:63:ASN:N	2	32.57
(1,102)	1:A:92:LYS:N	1:A:92:LYS:CA	1:A:92:LYS:C	1:A:93:PRO:N	5	32.45
(1,94)	1:A:85:ILE:N	1:A:85:ILE:CA	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	20	32.44
(1,70)	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	1:A:63:ASN:N	19	32.44
(1,20)	1:A:16:ILE:N	1:A:16:ILE:CA	1:A:16:ILE:C	1:A:17:PRO:N	8	32.36
(1,41)	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	1:A:30:TYR:CA	1:A:30:TYR:C	17	32.18
(1,81)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	20	32.12
(1,20)	1:A:16:ILE:N	1:A:16:ILE:CA	1:A:16:ILE:C	1:A:17:PRO:N	2	31.89
(1,142)	1:A:116:THR:N	1:A:116:THR:CA	1:A:116:THR:C	1:A:117:THR:N	18	31.8
(1,41)	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	1:A:30:TYR:CA	1:A:30:TYR:C	9	31.73
(1,20)	1:A:16:ILE:N	1:A:16:ILE:CA	1:A:16:ILE:C	1:A:17:PRO:N	4	31.73
(1,142)	1:A:116:THR:N	1:A:116:THR:CA	1:A:116:THR:C	1:A:117:THR:N	17	31.69
(1,142)	1:A:116:THR:N	1:A:116:THR:CA	1:A:116:THR:C	1:A:117:THR:N	11	31.62
(1,94)	1:A:85:ILE:N	1:A:85:ILE:CA	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	11	31.49
<del></del>	•				· · · · ·	ed on nert nage



Key	$egin{array}{c} ed \ from \ previous \ poly \ egin{array}{c} \mathbf{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( o )
(1,12)	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	1:A:13:ARG:N	11	31.45
(1,94)	1:A:85:ILE:N	1:A:85:ILE:CA	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	7	31.43
(1,94)	1:A:85:ILE:N	1:A:85:ILE:CA	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	9	31.14
(1,142)	1:A:116:THR:N	1:A:116:THR:CA	1:A:116:THR:C	1:A:117:THR:N	13	31.14
(1,20)	1:A:16:ILE:N	1:A:16:ILE:CA	1:A:16:ILE:C	1:A:17:PRO:N	12	31.06
(1,20)	1:A:16:ILE:N	1:A:16:ILE:CA	1:A:16:ILE:C	1:A:17:PRO:N	5	30.95
(1,142)	1:A:116:THR:N	1:A:116:THR:CA	1:A:116:THR:C	1:A:117:THR:N	9	30.65
(1,20)	1:A:16:ILE:N	1:A:16:ILE:CA	1:A:16:ILE:C	1:A:17:PRO:N	13	30.62
(1,142)	1:A:116:THR:N	1:A:116:THR:CA	1:A:116:THR:C	1:A:117:THR:N	10	30.46
(1,142)	1:A:116:THR:N	1:A:116:THR:CA	1:A:116:THR:C	1:A:117:THR:N	1	30.33
(1,20)	1:A:16:ILE:N	1:A:16:ILE:CA	1:A:16:ILE:C	1:A:17:PRO:N	10	30.29
(1,142)	1:A:116:THR:N	1:A:116:THR:CA	1:A:116:THR:C	1:A:117:THR:N	2	30.23
(1,12)	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	1:A:13:ARG:N	6	30.15
(1,142)	1:A:116:THR:N	1:A:116:THR:CA	1:A:116:THR:C	1:A:117:THR:N	6	30.13
(1,142)	1:A:116:THR:N	1:A:116:THR:CA	1:A:116:THR:C	1:A:117:THR:N	14	30.03
(1,94)	1:A:85:ILE:N	1:A:85:ILE:CA	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	2	29.89
(1,142)	1:A:116:THR:N	1:A:116:THR:CA	1:A:116:THR:C	1:A:117:THR:N	3	29.64
(1,20)	1:A:16:ILE:N	1:A:16:ILE:CA	1:A:16:ILE:C	1:A:17:PRO:N	6	29.62
(1,12)	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	1:A:13:ARG:N	18	29.56
(1,20)	1:A:16:ILE:N	1:A:16:ILE:CA	1:A:16:ILE:C	1:A:17:PRO:N	19	29.51
(1,102)	1:A:92:LYS:N	1:A:92:LYS:CA	1:A:92:LYS:C	1:A:93:PRO:N	4	29.29
(1,7)	1:A:9:ARG:C	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	13	29.27
(1,142)	1:A:116:THR:N	1:A:116:THR:CA	1:A:116:THR:C	1:A:117:THR:N	12	29.25
(1,20)	1:A:16:ILE:N	1:A:16:ILE:CA	1:A:16:ILE:C	1:A:17:PRO:N	3	29.19
(1,102)	1:A:92:LYS:N	1:A:92:LYS:CA	1:A:92:LYS:C	1:A:93:PRO:N	16	29.13
(1,142)	1:A:116:THR:N	1:A:116:THR:CA	1:A:116:THR:C	1:A:117:THR:N	7	29.09
(1,142)	1:A:116:THR:N	1:A:116:THR:CA	1:A:116:THR:C	1:A:117:THR:N	15	29.02
(1,102)	1:A:92:LYS:N	1:A:92:LYS:CA	1:A:92:LYS:C	1:A:93:PRO:N	13	28.87
(1,94)	1:A:85:ILE:N	1:A:85:ILE:CA	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	19	28.78
(1,116)	1:A:102:SER:N	1:A:102:SER:CA	1:A:102:SER:C	1:A:103:GLU:N	15	28.63
(1,142)	1:A:116:THR:N	1:A:116:THR:CA	1:A:116:THR:C	1:A:117:THR:N	19	28.57
(1,96)	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	9	27.94
(1,20)	1:A:16:ILE:N	1:A:16:ILE:CA	1:A:16:ILE:C	1:A:17:PRO:N	14	27.93
(1,81)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	12	27.84
(1,7)	1:A:9:ARG:C	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	6	27.76
(1,142)	1:A:116:THR:N	1:A:116:THR:CA	1:A:116:THR:C	1:A:117:THR:N	8	27.53
(1,41)	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	1:A:30:TYR:CA	1:A:30:TYR:C	8	27.31
(1,116)	1:A:102:SER:N	1:A:102:SER:CA	1:A:102:SER:C	1:A:103:GLU:N	4	27.3
(1,41)	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	1:A:30:TYR:CA	1:A:30:TYR:C	12	27.27
(1,102)	1:A:92:LYS:N	1:A:92:LYS:CA	1:A:92:LYS:C	1:A:93:PRO:N	6	26.81
(1,7)	1:A:9:ARG:C	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	9	26.74
(1,12)	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	1:A:13:ARG:N	7	26.63
(1,96)	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	20	26.58
(1,20)	1:A:16:ILE:N	1:A:16:ILE:CA	1:A:16:ILE:C	1:A:17:PRO:N	20	26.54
(1,20) $(1,7)$	1:A:9:ARG:C	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	12	26.53
(1,142)	1:A:116:THR:N	1:A:116:THR:CA	1:A:116:THR:C	1:A:117:THR:N	4	26.42
(1,70)	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	1:A:63:ASN:N	1	26.33
(1,124)	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	1:A:108:THR:N	3	26.29
(1,20)	1:A:16:ILE:N	1:A:16:ILE:CA	1:A:16:ILE:C	1:A:17:PRO:N	17	26.07
(1,142)	1:A:116:THR:N	1:A:116:THR:CA	1:A:116:THR:C	1:A:117:THR:N	20	26.03
(1,142) $(1,102)$	1:A:92:LYS:N	1:A:92:LYS:CA	1:A:92:LYS:C	1:A:93:PRO:N	7	25.98
(-,-02)	1.11.02.1110.11	1.11.02.21.0.011	1.11.02.210.0	1.11.55.1165.11		ed on nert nage



	ed from previous po					774 7 14
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( o )
(1,142)	1:A:116:THR:N	1:A:116:THR:CA	1:A:116:THR:C	1:A:117:THR:N	5	25.9
(1,7)	1:A:9:ARG:C	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	4	25.77
(1,20)	1:A:16:ILE:N	1:A:16:ILE:CA	1:A:16:ILE:C	1:A:17:PRO:N	1	25.75
(1,70)	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	1:A:63:ASN:N	18	25.73
(1,102)	1:A:92:LYS:N	1:A:92:LYS:CA	1:A:92:LYS:C	1:A:93:PRO:N	1	25.6
(1,20)	1:A:16:ILE:N	1:A:16:ILE:CA	1:A:16:ILE:C	1:A:17:PRO:N	16	25.42
(1,7)	1:A:9:ARG:C	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	2	25.24
(1,116)	1:A:102:SER:N	1:A:102:SER:CA	1:A:102:SER:C	1:A:103:GLU:N	10	25.21
(1,142)	1:A:116:THR:N	1:A:116:THR:CA	1:A:116:THR:C	1:A:117:THR:N	16	24.87
(1,81)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	7	24.76
(1,12)	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	1:A:13:ARG:N	10	24.65
(1,102)	1:A:92:LYS:N	1:A:92:LYS:CA	1:A:92:LYS:C	1:A:93:PRO:N	14	24.64
(1,70)	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	1:A:63:ASN:N	9	24.61
(1,20)	1:A:16:ILE:N	1:A:16:ILE:CA	1:A:16:ILE:C	1:A:17:PRO:N	18	24.6
(1,20)	1:A:16:ILE:N	1:A:16:ILE:CA	1:A:16:ILE:C	1:A:17:PRO:N	7	24.32
(1,7)	1:A:9:ARG:C	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	19	24.27
(1,7)	1:A:9:ARG:C	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	5	24.25
(1,41)	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	1:A:30:TYR:CA	1:A:30:TYR:C	18	24.14
(1,7)	1:A:9:ARG:C	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	17	23.96
(1,7)	1:A:9:ARG:C	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	20	23.47
(1,95)	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	10	23.41
(1,81)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	11	23.08
(1,96)	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	18	22.96
(1,97)	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	1:A:87:TRP:CA	1:A:87:TRP:C	14	22.82
(1,81)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	16	22.82
(1,20)	1:A:16:ILE:N	1:A:16:ILE:CA	1:A:16:ILE:C	1:A:17:PRO:N	15	22.74
(1,7)	1:A:9:ARG:C	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	10	22.72
(1,7)	1:A:9:ARG:C	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	18	22.7
(1,11)	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	1	22.56
(1,94)	1:A:85:ILE:N	1:A:85:ILE:CA	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	14	22.3
(1,81)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	15	22.29
(1,94)	1:A:85:ILE:N	1:A:85:ILE:CA	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	6	22.2
(1,124)	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	1:A:108:THR:N	16	22.08
(1,81)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	5	21.87
(1,7)	1:A:9:ARG:C	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	15	21.84
(1,7)	1:A:9:ARG:C	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	11	21.66
(1,70)	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	1:A:63:ASN:N	14	21.23
(1,96)	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	11	21.06
(1,70)	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	1:A:63:ASN:N	10	20.89
(1,96)	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	12	20.6
(1,124)	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	1:A:108:THR:N	19	20.55
(1,81)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	8	20.53
(1,124)	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	1:A:108:THR:N	1	20.4
(1,70)	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	1:A:63:ASN:N	20	20.19
(1,95)	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	18	20.17
(1,7)	1:A:9:ARG:C	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	16	19.99
(1,70)	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	1:A:63:ASN:N	15	19.92
(1,96)	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	13	19.58
(1,96)	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	6	19.37
(1,94)	1:A:85:ILE:N	1:A:85:ILE:CA	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	15	19.3
(1,96)	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	8	19.0



	ed from previous po		A		3.6.1.1	<b>T</b> 71 1 11 ( )
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,96)	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	7	18.77
(1,70)	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	1:A:63:ASN:N	4	18.77
(1,116)	1:A:102:SER:N	1:A:102:SER:CA	1:A:102:SER:C	1:A:103:GLU:N	8	18.58
(1,8)	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	17	18.45
(1,70)	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	1:A:63:ASN:N	6	18.32
(1,81)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	2	17.42
(1,116)	1:A:102:SER:N	1:A:102:SER:CA	1:A:102:SER:C	1:A:103:GLU:N	1	17.37
(1,81)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	13	17.11
(1,124)	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	1:A:108:THR:N	17	16.59
(1,7)	1:A:9:ARG:C	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	14	16.25
(1,7)	1:A:9:ARG:C	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	3	16.1
(1,116)	1:A:102:SER:N	1:A:102:SER:CA	1:A:102:SER:C	1:A:103:GLU:N	11	15.99
(1,95)	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	12	15.97
(1,81)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	3	15.94
(1,116)	1:A:102:SER:N	1:A:102:SER:CA	1:A:102:SER:C	1:A:103:GLU:N	13	15.86
(1,116)	1:A:102:SER:N	1:A:102:SER:CA	1:A:102:SER:C	1:A:103:GLU:N	5	15.65
(1,116)	1:A:102:SER:N	1:A:102:SER:CA	1:A:102:SER:C	1:A:103:GLU:N	17	15.47
(1,81)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	19	15.28
(1,8)	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	19	15.24
(1,122)	1:A:105:GLY:N	1:A:105:GLY:CA	1:A:105:GLY:C	1:A:106:ASP:N	17	15.16
(1,81)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	4	14.95
(1,12)	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	1:A:13:ARG:N	14	14.74
(1,116)	1:A:102:SER:N	1:A:102:SER:CA	1:A:102:SER:C	1:A:103:GLU:N	16	14.63
(1,116)	1:A:102:SER:N	1:A:102:SER:CA	1:A:102:SER:C	1:A:103:GLU:N	18	14.44
(1,7)	1:A:9:ARG:C	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	8	14.36
(1,12)	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	1:A:13:ARG:N	16	14.29
(1,95)	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	16	14.11
(1,12)	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	1:A:13:ARG:N	1	13.99
(1,94)	1:A:85:ILE:N	1:A:85:ILE:CA	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	16	13.92
(1,12)	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	1:A:13:ARG:N	5	13.8
(1,124)	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	1:A:108:THR:N	13	13.74
(1,96)	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	15	13.64
(1,124)	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	1:A:108:THR:N	18	13.62
(1,116)	1:A:102:SER:N	1:A:102:SER:CA	1:A:102:SER:C	1:A:103:GLU:N	14	13.51
(1,116)	1:A:102:SER:N		1:A:102:SER:C	1:A:103:GLU:N	2	13.21
(1,116)	1:A:102:SER:N	1:A:102:SER:CA	1:A:102:SER:C	1:A:103:GLU:N	19	12.77
(1,7)	1:A:9:ARG:C	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	7	12.65
(1,12)	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	1:A:13:ARG:N	13	12.41
(1,70)	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	1:A:63:ASN:N	12	12.34
(1,124)	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	1:A:108:THR:N	14	12.24
(1,94)	1:A:85:ILE:N	1:A:85:ILE:CA	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	12	12.14
(1,95)	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	15	12.02
(1,116)	1:A:102:SER:N	1:A:102:SER:CA	1:A:102:SER:C	1:A:103:GLU:N	12	11.24
(1,110) $(1,9)$	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	15	11.1
(1,59)	1:A:45:ASN:C	1:A:46:ARG:N	1:A:46:ARG:CA	1:A:46:ARG:C	6	11.05
(1,70)	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	1:A:63:ASN:N	16	11.03
(1,10) $(1,96)$	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	4	10.87
(1,30) $(1,124)$	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	1:A:108:THR:N	11	10.75
(1,124) $(1,8)$	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:107.GE1.C	1:A:11:LEU:N	2	10.41
(1,0) $(1,12)$	1:A:10:ALA:N 1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	1:A:13:ARG:N	19	10.41
(1,12) $(1,102)$	1:A:92:LYS:N	1:A:92:LYS:CA	1:A:92:LYS:C	1:A:93:PRO:N	20	9.97
(1,104)	1.A.94.LI 3.IV	1.A.32.L13.UA	1.A.92.L13.U	1.A.33.F RO:N		9.91



	ed from previous po					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$oxed{Violation}$ ( $\circ$ )
(1,4)	1:A:8:GLU:N	1:A:8:GLU:CA	1:A:8:GLU:C	1:A:9:ARG:N	1	9.7
(1,94)	1:A:85:ILE:N	1:A:85:ILE:CA	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	10	9.61
(1,124)	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	1:A:108:THR:N	12	9.51
(1,8)	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	13	9.49
(1,94)	1:A:85:ILE:N	1:A:85:ILE:CA	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	18	8.94
(1,70)	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	1:A:63:ASN:N	8	8.81
(1,8)	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1	8.74
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	3	7.92
(1,81)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	17	7.83
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	9	7.75
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	18	7.58
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	2	7.51
(1,203)	1:A:168:GLN:C	1:A:169:GLU:N	1:A:169:GLU:CA	1:A:169:GLU:C	19	7.33
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	5	7.29
(1,8)	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	15	7.27
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	17	7.24
(1,36)	1:A:27:ARG:N	1:A:27:ARG:CA	1:A:27:ARG:C	1:A:28:GLN:N	1	7.22
(1,104)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:VAL:N	4	7.12
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	18	7.0
(1,70)	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	1:A:63:ASN:N	7	6.93
(1,8)	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	3	6.84
(1,96)	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	14	6.74
(1,95)	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	1	6.74
(1,12)	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	1:A:13:ARG:N	12	6.52
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	10	6.48
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	13	6.48
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	2	6.24
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	4	6.21
(1,140)	1:A:115:ALA:N	1:A:115:ALA:CA	1:A:115:ALA:C	1:A:116:THR:N	4	6.21
(1,38)	1:A:28:GLN:N	1:A:28:GLN:CA	1:A:28:GLN:C	1:A:29:ARG:N	5	6.2
(1,96)	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	19	6.05
(1,65)	1:A:51:PHE:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	7	5.92
(1,110)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:ARG:N	19	5.84
(1,122)	1:A:105:GLY:N	1:A:105:GLY:CA	1:A:105:GLY:C	1:A:106:ASP:N	7	5.75
(1,12)	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	1:A:13:ARG:N	3	5.65
(1,140)	1:A:115:ALA:N	1:A:115:ALA:CA	1:A:115:ALA:C	1:A:116:THR:N	8	5.63
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	17	5.62
(1,88)	1:A:82:ARG:N	1:A:82:ARG:CA	1:A:82:ARG:C	1:A:83:LEU:N	18	5.49
(1,4)	1:A:8:GLU:N	1:A:8:GLU:CA	1:A:8:GLU:C	1:A:9:ARG:N	8	5.49
(1,203)	1:A:168:GLN:C	1:A:169:GLU:N	1:A:169:GLU:CA	1:A:169:GLU:C	2	5.46
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	12	5.45
(1,132) $(1,116)$	1:A:102:SER:N	1:A:102:SER:CA	1:A:102:SER:C	1:A:103:GLU:N	3	5.44
(1,30)	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	1:A:25:ILE:N	3	5.4
(1,73)	1:A:63:ASN:C	1:A:64:PHE:N	1:A:64:PHE:CA	1:A:64:PHE:C	12	5.38
(1,40)	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	9	5.34
(1,120)	1:A:104:GLU:N	1:A:104:GLU:CA	1:A:104:GLU:C	1:A:105:GLY:N	4	5.27
(1,120) $(1,9)$	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	20	5.19
(1,203)	1:A:168:GLN:C	1:A:169:GLU:N	1:A:169:GLU:CA	1:A:169:GLU:C	1	5.14
(1,200) $(1,9)$	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	19	5.11
(1,173)	1:A:132:ALA:C	1:A:133:LEU:N	1:A:133:LEU:CA	1:A:133:LEU:C	7	5.01
(1,170) $(1,40)$	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	12	4.97
(1,10)	1.11.20.11100.11	1.11.20.1110.011	1.11.20.11160.0	1.11.00.1 110.11		ed on nert nage



	ed from previous pe		<b>.</b>			<b>T70 1 10</b> ( )
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( o )
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	19	4.93
(1,38)	1:A:28:GLN:N	1:A:28:GLN:CA	1:A:28:GLN:C	1:A:29:ARG:N	4	4.92
(1,75)	1:A:64:PHE:C	1:A:65:ALA:N	1:A:65:ALA:CA	1:A:65:ALA:C	10	4.86
(1,96)	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	1	4.84
(1,75)	1:A:64:PHE:C	1:A:65:ALA:N	1:A:65:ALA:CA	1:A:65:ALA:C	6	4.84
(1,65)	1:A:51:PHE:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	20	4.83
(1,136)	1:A:113:GLU:N	1:A:113:GLU:CA	1:A:113:GLU:C	1:A:114:HIS:N	3	4.82
(1,104)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:VAL:N	19	4.82
(1,65)	1:A:51:PHE:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	18	4.79
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	18	4.77
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	16	4.73
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	13	4.67
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	14	4.67
(1,75)	1:A:64:PHE:C	1:A:65:ALA:N	1:A:65:ALA:CA	1:A:65:ALA:C	14	4.63
(1,24)	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1:A:21:ALA:N	10	4.6
(1,138)	1:A:114:HIS:N	1:A:114:HIS:CA	1:A:114:HIS:C	1:A:115:ALA:N	8	4.6
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	16	4.58
(1,203)	1:A:168:GLN:C	1:A:169:GLU:N	1:A:169:GLU:CA	1:A:169:GLU:C	5	4.56
(1,39)	1:A:28:GLN:C	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	8	4.54
(1,104)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:VAL:N	5	4.54
(1,203)	1:A:168:GLN:C	1:A:169:GLU:N	1:A:169:GLU:CA	1:A:169:GLU:C	13	4.53
(1,65)	1:A:51:PHE:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	12	4.52
(1,104)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:VAL:N	8	4.52
(1,40)	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	3	4.51
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	20	4.5
(1,4)	1:A:8:GLU:N	1:A:8:GLU:CA	1:A:8:GLU:C	1:A:9:ARG:N	19	4.48
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	14	4.44
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	8	4.44
(1,130)	1:A:110:LEU:N	1:A:110:LEU:CA	1:A:110:LEU:C	1:A:111:GLU:N	15	4.37
(1,39)	1:A:28:GLN:C	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	1	4.36
(1,92)	1:A:84:THR:N	1:A:84:THR:CA	1:A:84:THR:C	1:A:85:ILE:N	18	4.33
(1,201)	1:A:167:SER:C	1:A:168:GLN:N	1:A:168:GLN:CA	1:A:168:GLN:C	6	4.3
(1,173)	1:A:132:ALA:C	1:A:133:LEU:N	1:A:133:LEU:CA	1:A:133:LEU:C	14	4.28
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	4	4.25
(1,40)	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	14	4.24
(1,36)	1:A:27:ARG:N	1:A:27:ARG:CA	1:A:27:ARG:C	1:A:28:GLN:N	19	4.22
(1,38)	1:A:28:GLN:N	1:A:28:GLN:CA	1:A:28:GLN:C	1:A:29:ARG:N	19	4.21
(1,140)	1:A:115:ALA:N	1:A:115:ALA:CA	1:A:115:ALA:C	1:A:116:THR:N	19	4.21
(1,77)	1:A:73:ASP:C	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1	4.2
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	11	4.18
(1,4)	1:A:8:GLU:N	1:A:8:GLU:CA	1:A:8:GLU:C	1:A:9:ARG:N	4	4.17
(1,16)	1:A:14:ARG:N	1:A:14:ARG:CA	1:A:14:ARG:C	1:A:15:THR:N	18	4.17
(1,124)	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	1:A:108:THR:N	7	4.16
(1,120)	1:A:104:GLU:N	1:A:104:GLU:CA	1:A:104:GLU:C	1:A:105:GLY:N	1	4.14
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	11	4.13
(1,77)	1:A:73:ASP:C	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	2	4.13
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	7	4.12
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	9	4.1
(1,59)	1:A:45:ASN:C	1:A:46:ARG:N	1:A:46:ARG:CA	1:A:46:ARG:C	14	4.09
(1,16)	1:A:14:ARG:N	1:A:14:ARG:CA	1:A:14:ARG:C	1:A:15:THR:N	7	4.09
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	3	4.02



(1.140	Key	$egin{array}{c} ed \ from \ previous \ poly \ \hline  old Atom-1 \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( o )
(1,140							` '
(1,73)	· · /						_
(1,26)	· · /						
(1,10)	( ' /						
(1,108)   1:A-98:GLU:N	( ' /						
(1,96)	( , ,						
(1,15)	( ' /						
(1,40)   1-A-29-ARG:N   1-A-29-ARG:CA   1-A-29-ARG:C   1-A-30-TYR:N   19   3.77   (1,108)   1-A-98-GLU:N   1-A-98-GLU:CA   1-A-198-GLU:CA   1-A-198-GLU:CN   1-A-199-LEU:N   16   3.77   (1,40)   1-A-29-ARG:N   1-A-29-ARG:CA   1-A-29-ARG:C   1-A-29-TYR:N   17   3.76   (1,40)   1-A-29-ARG:N   1-A-29-ARG:CA   1-A-29-ARG:C   1-A-20-TYR:N   17   3.73   (1,34)   1-A-26-ILE:N   1-A-26-ILE:CA   1-A-26-ILE:CC   1-A-27-ARG:N   17   3.73   (1,34)   1-A-26-ILE:N   1-A-26-ILE:CA   1-A-26-ILE:C   1-A-27-ARG:N   17   3.73   (1,34)   1-A-26-ILE:N   1-A-26-ILE:CA   1-A-26-ILE:C   1-A-27-ARG:N   5   3.71   (1,34)   1-A-26-ILE:N   1-A-26-ILE:CA   1-A-26-ILE:C   1-A-27-ARG:N   5   3.71   (1,34)   1-A-26-ILE:N   1-A-26-ILE:CA   1-A-26-ILE:C   1-A-27-ARG:N   6   3.7   (1,164)   1-A-128-GLY:N   1-A-128-GLY:CA   1-A-128-GLY:C   1-A-27-ARG:N   6   3.7   (1,164)   1-A-128-GLY:N   1-A-128-GLY:CA   1-A-128-GLY:C   1-A-129-TRP:N   6   3.7   (1,164)   1-A-128-GLY:N   1-A-128-GLY:CA   1-A-128-GLY:C   1-A-129-TRP:N   6   3.7   (1,162)   1-A-12-GLY:N   1-A-112-GLY:CA   1-A-12-GLY:C   1-A-12-GLY:N   1-A-12-GLY:CA   1-A-12-GLY:C   1-A-12-GLY:N   1   3-68   (1,12)   1-A-12-GLY:N   1-A-12-GLY:CA   1-A-12-GLY:C   1-A-13-ARG:N   9   3-68   (1,75)   1-A-64-PHE:C   1-A-65-ALA:N   1-A-65-ALA:CA   1-A-36-GLY:C   1-A-38-GLY:N   17   3-6   (1,92)   1-A-29-ARG:N   1-A-29-ARG:CA   1-A-28-GLY:C   1-A-28-GLY:N   17   3-6   (1,92)   1-A-29-ARG:N   1-A-29-ARG:CA   1-A-29-ARG:C   1-A-28-GLY:N   17   3-6   (1,92)   1-A-29-ARG:N   1-A-29-ARG:CA   1-A-29-ARG:C   1-A-38-GLY:N   6   3-54   (1,94)   1-A-129-ARG:N   1-A-29-ARG:CA   1-A-28-ARG:C   1-A-38-GLY:N   6   3-54   (1,94)   1-A-129-ARG:N   1-A-29-ARG:CA   1-A-28-ARG:C   1-A-38-GLY:N   6   3-54   (1,94)   1-A-129-ARG:N   1-A-29-ARG:CA   1-A-28-ARG:C   1-A-38-GLY:N   6	( / /			1:A:13:ARG:CA	1:A:13:ARG:C		
(1,108	· · /	1:A:29:ARG:N		1:A:29:ARG:C			
(1,10)	( / /						
(1,40)	( ' /						
(1,34)	( ' /						
(1,203)         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1:A:169:GLU:CA         1:A:169:GLU:C         3         3.73           (1,34)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         5         3.71           (1,164)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         6         3.7           (1,164)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:212:ILE:C         1:A:212:ILE:N         6         3.7           (1,164)         1:A:212:ILE:N         1:A:14:ARG:CA         1:A:14:ARG:C         1:A:12:ITE:DU:N         1         3.68           (1,12)         1:A:21:ILEU:N         1:A:11:IGUU:C         1:A:11:IGUU:C         1:A:21:ICEU:N         1         3.68           (1,75)         1:A:64:PHE:C         1:A:65:ALA:N         1:A:65:ALA:CA         1:A:26:ALC:C         1:A:33:ARG:N         9         3.68           (1,75)         1:A:64:PHE:C         1:A:26:ARG:CA         1:A:26:ARG:CA         1:A:26:GLU:C         1:A:36:GLU:C         1:A:36:	( ' /						
(1,34)	( , ,						
(1,34)	( ' /						
(1,164)         1:A:128:GLY:N         1:A:128:GLY:CA         1:A:128:GLY:C         1:A:129:TRP:N         6         3.7           (1,16)         1:A:14:ARG:N         1:A:14:ARG:CA         1:A:14:ARG:C         1:A:15:THR:N         15         3.68           (1,132)         1:A:11:GU:C         1:A:11:GU:C         1:A:12:EUN         1         3.68           (1,75)         1:A:46:PHE:C         1:A:65:ALA:N         1:A:65:ALA:C         12         3.63           (1,36)         1:A:27:ARG:N         1:A:27:ARG:CA         1:A:27:ARG:C         1:A:28:GLN:N         17         3.6           (1,92)         1:A:84:THR:N         1:A:84:THR:C         1:A:36:GLU:C         1:A:36:GLU:C         1:A:35:TEN         14         3.59           (1,48)         1:A:36:GLU:N         1:A:36:GLU:CA         1:A:29:ARG:C         1:A:36:GLU:C         1:A:37:VAL:N         6         3.56           (1,40)         1:A:29:ARG:C         1:A:24:TEN         1:A:24:TEN         6         3.54           (1,174)         1:A:23:SER:C         1:A:24:TEN         1:A:24:TEN         5         3.51           (1,88)         1:A:10:ALA:N         1:A:10:ALA:CA         1:A:11:LEU:C         6         3.54           (1,140)         1:A:41:ARS         1:A:42:ARG:CA	· · /						
(1,16) 1:A:14:ARG:N 1:A:14:ARG:CA 1:A:14:ARG:C 1:A:15:THR:N 15 3.68 (1,132) 1:A:111:GLU:N 1:A:111:GLU:CA 1:A:111:GLU:C 1:A:112:EU.N 1 3.68 (1,12) 1:A:12:GLY:N 1:A:12:GLY:CA 1:A:12:GLY:C 1:A:13:ARG:N 9 3.68 (1,75) 1:A:64:PHE:C 1:A:65:ALA:N 1:A:65:ALA:CA 1:A:65:ALA:C 12 3.63 (1,36) 1:A:27:ARG:N 1:A:27:ARG:CA 1:A:27:ARG:C 1:A:28:GLN:N 17 3.6 (1,92) 1:A:84:THR:N 1:A:84:THR:CA 1:A:84:THR:C 1:A:36:GLU:N 1:A:36:GLU:N 1:A:36:GLU:C 1:A:28:GLN:N 17 3.6 (1,40) 1:A:29:ARG:N 1:A:29:ARG:CA 1:A:29:ARG:C 1:A:28:GLN:N 6 3.56 (1,40) 1:A:29:ARG:N 1:A:29:ARG:CA 1:A:29:ARG:C 1:A:30:TYR:N 6 3.54 (1,29) 1:A:23:SER:C 1:A:24:ILE:N 1:A:24:ILE:CA 1:A:34:TLE:C 6 3.54 (1,174) 1:A:133:LEU:N 1:A:133:LEU:CA 1:A:133:LEU:C 1:A:134:ASP:N 1 3.52 (1,8) 1:A:123:AB:N 1:A:133:LEU:CA 1:A:134:AB:N 1 3.52 (1,8) 1:A:133:LEU:N 1:A:133:LEU:CA 1:A:134:AB:N 1 3.48 (1,140) 1:A:115:ALA:N 1:A:115:ALA:CA 1:A:115:ALA:C 1:A:116:AB:C 1.A:116:THR:N 17 3.48 (1,140) 1:A:15:AB:N 1:A:16:AB:N 1:A:16:AB:CA 1:A:16:AB:CC 10 3.47 (1,65) 1:A:15:AB:N 1 1:A:15:ALA:CA 1:A:16:AB:CG 1:A:16:GB:GLU:C 8 3.45 (1,20) 1:A:16:AB:CD:C 1:A:16:AB:CD:C 10 3.47 (1,65) 1:A:16:AB:CD:C 1:A:16:AB:CD:C 1:A:16:AB:CD:C 10 3.47 (1,65) 1:A:16:AB:CD:CD:CD:CD:CD:CD:CD:CD:CD:CD:CD:CD:CD:	( ' /						
(1,132)         1:A:111:GLU:N         1:A:111:GLU:C         1:A:112:LEU:N         1         3.68           (1,12)         1:A:12:GLY:N         1:A:12:GLY:CA         1:A:12:GLY:C         1:A:13:ARG:N         9         3.68           (1,75)         1:A:64:PHE:C         1:A:65:ALA:C         1:A:65:ALA:C         12         3.63           (1,36)         1:A:27:ARG:N         1:A:27:ARG:C         1:A:28:GLN:N         17         3.6           (1,92)         1:A:84:THR:N         1:A:84:THR:C         1:A:84:THR:C         1:A:85:LEN         14         3.59           (1,48)         1:A:36:GLU:N         1:A:36:GLU:CA         1:A:36:GLU:C         1:A:37:VAL:N         6         3.56           (1,40)         1:A:29:ARG:N         1:A:29:ARG:C         1:A:36:TYR:N         6         3.54           (1,29)         1:A:23:SER:C         1:A:24:ILE:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:34:ILE:C         6         3.54           (1,174)         1:A:31:33:LEU:N         1:A:22:ARG:C         1:A:13:33:LEU:C         1:A:13:33:LEU:C         1:A:13:33:LEU:N         5         3.51           (1,28)         1:A:16:ARG:N         1:A:16:ALA:C         1:A:13:33:LEU:N         5         3.51           (1,28)         1:A:16:ARG:N         1:A:16:ARG:C	,						
(1,12) 1:A:12:GLY:N 1:A:12:GLY:CA 1:A:12:GLY:C 1:A:13:ARG:N 9 3.68 (1,75) 1:A:64:PHE:C 1:A:65:ALA:N 1:A:65:ALA:CA 1:A:65:ALA:CA 1:A:65:ALA:CA 1:A:65:ALA:CA 1:A:65:ALA:CA 1:A:65:ALA:CA 1:A:65:ALA:CA 1:A:65:ALA:CA 1:A:27:ARG:CA 1:A:27:ARG:CA 1:A:27:ARG:CA 1:A:27:ARG:CA 1:A:28:GLN:N 17 3.6 (1,92) 1:A:84:THR:N 1:A:84:THR:CA 1:A:84:THR:CA 1:A:84:THR:CA 1:A:84:THR:CA 1:A:85:ALE:N 14 3.59 (1,48) 1:A:29:ARG:N 1:A:29:ARG:CA 1:A:29:ARG:C 1:A:30:TYR:N 6 3.56 (1,40) 1:A:29:ARG:N 1:A:29:ARG:CA 1:A:29:ARG:C 1:A:30:TYR:N 6 3.54 (1,29) 1:A:23:SER:C 1:A:24:ILE:D 1:A:24:ILE:CA 1:A:24:ILE:C 6 3.54 (1,174) 1:A:133:LEU:N 1:A:133:LEU:CA 1:A:133:LEU:C 1:A:134:ASP:N 1 3.52 (1,8) 1:A:134:ASI-DI:N 1:A:10:ALA:CA 1:A:10:ALA:C 1:A:11:LEU:N 5 3.51 (1,28) 1:A:22:ARG:N 1:A:22:ARG:CA 1:A:22:ARG:C 1:A:23:SER:N 4 3.48 (1,140) 1:A:13-ALA:N 1:A:115:ALA:CA 1:A:115:ALA:C 1:A:11:LEU:N 5 3.51 (1,28) 1:A:22:ARG:N 1:A:22:ARG:CA 1:A:22:ARG:C 1:A:14:GARG:C 1:A:13:ASP:N 1 3.48 (1,59) 1:A:25:ALA:N 1:A:15:ALA:CA 1:A:15:ALA:CA 1:A:16:ALA:C 1:A:11:LEU:N 5 3.48 (1,59) 1:A:25:ABR:N 1:A:46:ARG:N 1:A:46:ARG:CA 1:A:46:ARG:C 10 3.47 (1,65) 1:A:51:PHE:C 1:A:52:ILE:N 1:A:52:ILE:CA 1:A:52:ILE:CA 1:A:16:GU:CA 1:A:16	( ' /						
(1,75)         1:A:64:PHE:C         1:A:65:ALA:N         1:A:65:ALA:CA         1:A:65:ALA:C         12         3.63           (1,36)         1:A:27:ARG:N         1:A:27:ARG:CA         1:A:27:ARG:C         1:A:28:GLN:N         17         3.6           (1,92)         1:A:84:THR:N         1:A:36:GLU:CA         1:A:36:GLU:CA         1:A:36:GLU:CA         1:A:36:GLU:N         6         3.56           (1,40)         1:A:29:ARG:N         1:A:29:ARG:CA         1:A:29:ARG:C         1:A:30:TYR:N         6         3.56           (1,40)         1:A:23:SER:C         1:A:24:ILE:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:24:ILE:C         6         3.54           (1,29)         1:A:23:SER:C         1:A:24:ILE:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:24:ILE:C         6         3.54           (1,74)         1:A:13:ALA:A         1:A:10:ALA:CA         1:A:10:ALA:C         1:A:13:ALEU:C         1:A:24:ILE:U         5         3.51           (1,28)         1:A:42:2ARG:N         1:A:22:ARG:CA         1:A:22:ARG:C         1:A:13:AS:BR:N         4         3.48           (1,140)         1:A:115:ALA:N         1:A:115:ALA:CA         1:A:115:ALA:C         1:A:16:THR:N         17         3.48           (1,59)         1:A:45:AS:SIN:C         1:A:46:ARG:N         1:A:46:ARG:CA	· · /						
(1,36) 1:A:27:ARG:N 1:A:27:ARG:CA 1:A:27:ARG:C 1:A:28:GLN:N 17 3.6 (1,92) 1:A:84:THR:N 1:A:84:THR:CA 1:A:84:GLU:CA 1:A:35:ILE:N 14 3.59 (1,48) 1:A:36:GLU:N 1:A:36:GLU:CA 1:A:36:GLU:CA 1:A:35:ILE:N 14 3.59 (1,48) 1:A:36:GLU:N 1:A:29:ARG:CA 1:A:36:GLU:CA 1:A:30:TYR:N 6 3.56 (1,40) 1:A:29:ARG:N 1:A:29:ARG:CA 1:A:29:ARG:C 1:A:30:TYR:N 6 3.54 (1,29) 1:A:23:SER:C 1:A:24:ILE:N 1:A:24:ILE:CA 1:A:24:ILE:C 6 3.54 (1,174) 1:A:133:IEU:N 1:A:133:IEU:CA 1:A:133:IEU:C 1:A:134:ASP:N 1 3.52 (1,8) 1:A:10:ALA:N 1:A:10:ALA:CA 1:A:133:IEU:C 1:A:134:ASP:N 1 3.52 (1,8) 1:A:10:ALA:N 1:A:10:ALA:CA 1:A:10:ALA:C 1:A:11:IEU:N 5 3.51 (1,28) 1:A:22:ARG:N 1:A:22:ARG:CA 1:A:22:ARG:C 1:A:23:SER:N 4 3.48 (1,140) 1:A:115:ALA:N 1:A:115:ALA:CA 1:A:115:ALA:C 1:A:116:THR:N 17 3.48 (1,59) 1:A:45:ASN:C 1:A:46:ARG:N 1:A:46:ARG:CA 1:A:46:ARG:C 10 3.47 (1,65) 1:A:51:PHE:C 1:A:52:ILE:N 1:A:169:GLU:CA 1:A:11:ILEU:C 6 3.46 (1,29) 1:A:168:GLN:C 1:A:11:ILEU:N 1:A:11:ILEU:CA 1:A:11:ILEU:C 16 3.42 (1,10) 1:A:167:SER:C 1:A:13:ILEU:N 1:A:116:GRI.N:N 1:A:11:ILEU:CA 1:A:11:ILEU:C 16 3.42 (1,201) 1:A:167:SER:C 1:A:168:GLN:N 1:A:168:GLN:CA 1:A:168:GLN:C 7 3.38 (1,34) 1:A:26:ILE:N 1:A:29:ILE:CA 1:A:26:ILE:CA 1:A:26:ILE:C 7 3.38 (1,34) 1:A:26:ILE:N 1:A:29:ILE:CA 1:A:26:ILE:CA 1:A:26:ILE:C 7 3.38 (1,34) 1:A:26:ILE:N 1:A:29:ILE:CA 1:A:26:ILE:CA 1:A:26:ILE:C 7 3.38 (1,34) 1:A:26:ILE:N 1:A:29:ILE:CA 1:A:26:ILE:C 1:A:29:ARG:N 7 3.37 (1,201) 1:A:167:SER:C 1:A:168:GLN:N 1:A:168:GLN:CA 1:A:168:GLN:C 1:A:168:GLN:C 1 1:A:168:GLN:C 1 1:A:168:GLN:C 1 1:A:168:GLN:C 1 1:A:168:GLN:C 1 1:A:168:GLN:C 1 1:A:29:ARG:N 7 3.37 (1,201) 1:A:169:GLU:N 1:A:29:ARG:N 1:A:29:ARG:N 1 3.37 (1,34) 1:A:26:ILE:N 1:A:29:ARG:N 1 1:A:29:ARG:N 1 3.37 (1,34) 1:A:26:ILE:N 1:A:29:ARG:N 1 1:A:29:ARG:N 1 3.39 (1,34) 1:A:26:ILE:N 1:A:29:ARG:N 1 1:A:29:ARG:N 1 3.36 (1,34) 1:A:29:ARG:N 1 1:A:29:ARG:N 1 3.39 (1,34) 1 1:A:26:ILE:N 1 1:A:29:ARG:N 1 3.39 (	. ,						
(1,92)         1:A:84:THR:N         1:A:84:THR:CA         1:A:84:THR:C         1:A:85:ILE:N         14         3.59           (1,48)         1:A:36:GU:N         1:A:36:GU:CA         1:A:36:GU:C         1:A:37:VAL:N         6         3.56           (1,40)         1:A:29:ARG:N         1:A:29:ARG:CA         1:A:29:ARG:CA         1:A:30:TYR:N         6         3.54           (1,29)         1:A:23:SER:C         1:A:24:ILE:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:30:TYR:N         6         3.54           (1,174)         1:A:133:LEU:N         1:A:133:LEU:CA         1:A:313:A3:DEU:CA         1:A:313:A3:DEU:CA         1:A:313:A3:DEU:CA         1:A:411:LEU:N         5         3.51           (1,8)         1:A:10:ALA:N         1:A:10:ALA:CA         1:A:10:ALA:CA         1:A:11:LEU:N         5         3.51           (1,28)         1:A:22:ARG:N         1:A:42:ARG:CA         1:A:42:ARG:CA         1:A:410:ALA:C         1:A:11:LEU:N         5         3.51           (1,28)         1:A:35:ASN:C         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:CA         1:A:416:ARG:CA         1:A:416:ARG:CA         1:A:416:ARG:CA         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:CA         1:A:416:ARG:CA         1:A:416:ARG:CA         1:A:416:ARG:CA         1:A:416:ARG:CA         1:A:416:ARG:CA	( ' /						
(1,48)         1:A:36:GLU:N         1:A:36:GLU:CA         1:A:36:GLU:C         1:A:37:VAL:N         6         3.56           (1,40)         1:A:29:ARG:N         1:A:29:ARG:CA         1:A:29:ARG:C         1:A:30:TYR:N         6         3.54           (1,29)         1:A:23:SER:C         1:A:24:ILE:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:30:TYR:N         6         3.54           (1,174)         1:A:23:SER:C         1:A:24:ILE:CA         1:A:24:ILE:CA         1:A:24:ILE:CA         3.54           (1,174)         1:A:13:ALA:N         1:A:10:ALA:CA         1:A:10:ALA:C         1:A:11:ILEU:N         5         3.51           (1,8)         1:A:10:ALA:N         1:A:10:ALA:CA         1:A:10:ALA:C         1:A:11:ILEU:N         5         3.51           (1,28)         1:A:42:ARG:N         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:C         1:A:46:ARG:C         1         3.48           (1,40)         1:A:45:ABN:C         1:A:46:ARG:N         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:C         10         3.47           (1,65)         1:A:46:ABR:C         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:C         1         3.45           (1,9)         1:A:16:ALA:C         1:A:16:GU:CA         1:A:16:GU:CA         1:A:11:LEU:C         16         3.42           (1,16)	,						
(1,40) 1:A:29:ARG:N 1:A:29:ARG:CA 1:A:29:ARG:C 1:A:30:TYR:N 6 3.54 (1,29) 1:A:23:SER:C 1:A:24:ILE:N 1:A:24:ILE:CA 1:A:24:ILE:C 6 3.54 (1,174) 1:A:133:LEU:N 1:A:133:LEU:CA 1:A:133:LEU:C 1:A:133:LEU:N 1:A:133:LEU:CA 1:A:133:LEU:C 1:A:133:LEU:N 1:A:133:LEU:CA 1:A:133:LEU:C 1:A:133:LEU:N 1 3.52 (1,8) 1:A:10:ALA:N 1:A:10:ALA:CA 1:A:10:ALA:C 1:A:11:LEU:N 5 3.51 (1,28) 1:A:22:ARG:N 1:A:22:ARG:CA 1:A:22:ARG:C 1:A:23:SER:N 4 3.48 (1,140) 1:A:115:ALA:N 1:A:115:ALA:CA 1:A:115:ALA:C 1:A:116:THR:N 17 3.48 (1,59) 1:A:45:ASN:C 1:A:46:ARG:N 1:A:46:ARG:CA 1:A:46:ARG:C 10 3.47 (1,65) 1:A:51:PHE:C 1:A:52:ILE:N 1:A:52:ILE:CA 1:A:52:ILE:C 6 3.46 (1,203) 1:A:168:GLN:C 1:A:16:GLU:N 1:A:11:LEU:CA 1:A:11:LEU:C 16 3.42 (1,60) 1:A:16:ARG:N 1:A:14:ARG:CA 1:A:11:LEU:CA 1:A:11:LEU:C 16 3.42 (1,16) 1:A:16:SER:C 1:A:16:SGLN:N 1:A:16:SGLN:CA 1:A:16:SGLN:C 7 3.38 (1,34) 1:A:26:ILE:N 1:A:26:ILE:CA 1:A:26:ILE:CA 1:A:16:SGLN:C 7 3.38 (1,34) 1:A:26:ILE:N 1:A:26:ILE:CA 1:A:26:ILE:CA 1:A:16:SGLN:C 7 3.38 (1,34) 1:A:26:ILE:N 1:A:26:ILE:CA 1:A:26:ILE:CA 1:A:16:SGLN:C 1:A:16:SGL	/						
(1,29) 1:A:23:SER:C 1:A:24:ILE:N 1:A:24:ILE:CA 1:A:24:ILE:C 6 3.54 (1,174) 1:A:133:LEU:N 1:A:133:LEU:C 1:A:133:LEU:C 1:A:134:ASP:N 1 3.52 (1,8) 1:A:10:ALA:N 1:A:10:ALA:CA 1:A:10:ALA:C 1:A:11:LEU:N 5 3.51 (1,28) 1:A:22:ARG:N 1:A:22:ARG:C A 1:A:22:ARG:C 1:A:11:LEU:N 5 3.51 (1,28) 1:A:22:ARG:N 1:A:22:ARG:C A 1:A:22:ARG:C 1:A:23:SER:N 4 3.48 (1,140) 1:A:115:ALA:N 1:A:115:ALA:CA 1:A:115:ALA:C 1:A:116:THR:N 17 3.48 (1,140) 1:A:15:ALA:N 1:A:15:ALA:CA 1:A:15:ALA:C 1:A:16:THR:N 17 3.48 (1,59) 1:A:45:ASN:C 1:A:46:ARG:N 1:A:46:ARG:C 1 1:A:46:ARG:C 10 3.47 (1,65) 1:A:51:PHE:C 1:A:52:ILE:N 1:A:52:ILE:CA 1:A:52:ILE:C 6 3.46 (1,203) 1:A:168:GLN:C 1:A:169:GLU:N 1:A:169:GLU:CA 1:A:169:GLU:C 8 3.45 (1,9) 1:A:10:ALA:C 1:A:11:LEU:N 1:A:11:LEU:CA 1:A:11:LEU:C 16 3.42 (1,16) 1:A:14:ARG:N 1:A:14:ARG:C 1:A:14:ARG:C 1:A:14:ARG:C 1:A:14:ARG:C 1:A:168:GLN:C 7 3.38 (1,34) 1:A:26:ILE:N 1:A:26:ILE:CA 1:A:26:ILE:C 1:A:27:ARG:N 7 3.37 (1,201) 1:A:167:SER:C 1:A:168:GLN:N 1:A:168:GLN:CA 1:A:168:GLN:C 16 3.37 (1,104) 1:A:96:GLU:N 1:A:96:GLU:CA 1:A:96:GLU:C 1:A:97:VAL:N 1 3.37 (1,34) 1:A:28:GLN:C 1:A:29:ARG:N 1:A:29:ARG:N 1:A:29:ARG:N 1 3.36 (1,34) 1:A:28:GLN:C 1:A:29:ARG:N 1:A:29:ARG:N 1 3.36 (1,34) 1:A:28:GLN:C 1 1:A:29:ARG:N 1 1:A:29:ARG:N 1 3.36 (1,34) 1:A:28:GLN:N 1 1:A:29:ARG:N 1 1:A:29:ARG:N 1 3.36 (1,34) 1:A:28:GLN:C 1 1:A:29:ARG:N 1 1:A:29:ARG:N 1 3.36 (1,34) 1:A:28:GLN:C 1 1:A:29:ARG:N 1 1:A:29:ARG:N 1 3.36 (1,34) 1:A:29:ARG:N 1 1:A:29:ARG:N 1 1:A:29:ARG:N 1 3.36 (1,34) 1:A:29:ARG:N 1 1	/						
(1,174)         1:A:133:LEU:N         1:A:133:LEU:CA         1:A:133:LEU:C         1:A:134:ASP:N         1         3.52           (1,8)         1:A:10:ALA:N         1:A:10:ALA:CA         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         5         3.51           (1,28)         1:A:21:ARG:N         1:A:22:ARG:CA         1:A:22:ARG:C         1:A:23:SER:N         4         3.48           (1,140)         1:A:15:ALA:N         1:A:15:ALA:CA         1:A:15:ALA:C         1:A:16:THR:N         17         3.48           (1,59)         1:A:45:ASN:C         1:A:46:ARG:N         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:C         10         3.47           (1,65)         1:A:5:PHE:C         1:A:46:ARG:C         10         3.47           (1,59)         1:A:16:SGN:C         1:A:169:GLU:N         1:A:169:GLU:CA         1:A:16:GRU:C         8         3.45           (1,90)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:16:GRU:C         8         3.45           (1,91)         1:A:10:ALA:C         1:A:14:ARG:CA         1:A:14:ARG:C         1:A:15:THR:N         3         3.42           (1,201)         1:A:16:TSER:C         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:16:GRN:CA         1:A:16:GRN:CA         7         3.38	· · /						
(1,8)         1:A:10:ALA:N         1:A:10:ALA:CA         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         5         3.51           (1,28)         1:A:22:ARG:N         1:A:22:ARG:CA         1:A:22:ARG:C         1:A:23:SER:N         4         3.48           (1,140)         1:A:115:ALA:N         1:A:115:ALA:CA         1:A:115:ALA:C         1:A:116:THR:N         17         3.48           (1,59)         1:A:45:ASN:C         1:A:46:ARG:N         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:C         10         3.47           (1,65)         1:A:51:PHE:C         1:A:52:ILE:N         1:A:52:ILE:CA         1:A:52:ILE:C         6         3.46           (1,203)         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1:A:169:GLU:CA         1:A:169:GLU:C         8         3.45           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:169:GLU:C         8         3.45           (1,9)         1:A:167:SER:C         1:A:168:GLN:N         1:A:14:ARG:C         1:A:15:THR:N         3         3.42           (1,201)         1:A:167:SER:C         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:168:GLN:C         7         3.38           (1,34)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         7 <t< td=""><td> /</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></t<>	/						
(1,28)         1:A:22:ARG:N         1:A:22:ARG:CA         1:A:22:ARG:C         1:A:23:SER:N         4         3.48           (1,140)         1:A:115:ALA:N         1:A:115:ALA:CA         1:A:115:ALA:C         1:A:116:THR:N         17         3.48           (1,59)         1:A:45:ASN:C         1:A:46:ARG:N         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:C         10         3.47           (1,65)         1:A:51:PHE:C         1:A:52:ILE:N         1:A:52:ILE:CA         1:A:52:ILE:C         6         3.46           (1,203)         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1:A:169:GLU:CA         1:A:169:GLU:C         8         3.45           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         16         3.42           (1,16)         1:A:14:ARG:N         1:A:14:ARG:CA         1:A:14:ARG:C         1:A:15:THR:N         3         3.42           (1,201)         1:A:167:SER:C         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:168:GLN:C         7         3.37           (1,201)         1:A:167:SER:C         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:168:GLN:C         7         3.37           (1,201)         1:A:168:GLV:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:168:GLN:CA         1:A:168:GLN:CA         1:A:							
(1,140)         1:A:115:ALA:N         1:A:115:ALA:CA         1:A:115:ALA:C         1:A:116:THR:N         17         3.48           (1,59)         1:A:45:ASN:C         1:A:46:ARG:N         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:C         10         3.47           (1,65)         1:A:51:PHE:C         1:A:52:ILE:N         1:A:52:ILE:CA         1:A:52:ILE:C         6         3.46           (1,203)         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1:A:169:GLU:CA         1:A:169:GLU:C         8         3.45           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         16         3.42           (1,16)         1:A:14:ARG:N         1:A:14:ARG:CA         1:A:14:ARG:C         1:A:15:THR:N         3         3.42           (1,201)         1:A:167:SER:C         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:168:GLN:C         7         3.38           (1,34)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         7         3.37           (1,104)         1:A:29:GLN:C         1:A:29:ARG:CA         1:A:29:ARG:CA         1:A:29:ARG:C         2         3.36           (1,34)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:29:ARG:CA         1:A:27:ARG:N         12	( . /						
(1,59)         1:A:45:ASN:C         1:A:46:ARG:N         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:C         10         3.47           (1,65)         1:A:51:PHE:C         1:A:52:ILE:N         1:A:52:ILE:CA         1:A:52:ILE:C         6         3.46           (1,203)         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1:A:169:GLU:CA         1:A:169:GLU:C         8         3.45           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         16         3.42           (1,16)         1:A:14:ARG:N         1:A:14:ARG:CA         1:A:14:ARG:C         1:A:15:THR:N         3         3.42           (1,201)         1:A:167:SER:C         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:168:GLN:C         7         3.38           (1,34)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         7         3.37           (1,201)         1:A:167:SER:C         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:168:GLN:C         16         3.37           (1,34)         1:A:29:GLU:N         1:A:29:GLU:CA         1:A:29:ARG:C         1:A:29:ARG:C         2         3.36           (1,39)         1:A:28:GLU:N         1:A:29:ARG:N         1:A:29:ARG:C         2         3.36	· · /					17	
(1,65)         1:A:51:PHE:C         1:A:52:ILE:N         1:A:52:ILE:CA         1:A:52:ILE:C         6         3.46           (1,203)         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1:A:169:GLU:CA         1:A:169:GLU:C         8         3.45           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         16         3.42           (1,16)         1:A:14:ARG:N         1:A:14:ARG:CA         1:A:14:ARG:C         1:A:15:THR:N         3         3.42           (1,201)         1:A:167:SER:C         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:168:GLN:C         7         3.38           (1,34)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         7         3.37           (1,201)         1:A:167:SER:C         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:4168:GLN:C         16         3.37           (1,201)         1:A:166:GLE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         7         3.37           (1,201)         1:A:36:GLD:N         1:A:468:GLN:CA         1:A:4168:GLN:C         16         3.37           (1,201)         1:A:26:ILE:N         1:A:29:ARG:CA         1:A:49:GLU:C         1:A:29:ARG:N         1         3.37	( ' /						
(1,203)         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1:A:169:GLU:CA         1:A:169:GLU:C         8         3.45           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         16         3.42           (1,16)         1:A:14:ARG:N         1:A:14:ARG:CA         1:A:14:ARG:C         1:A:15:THR:N         3         3.42           (1,201)         1:A:167:SER:C         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:168:GLN:C         7         3.38           (1,34)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         7         3.37           (1,201)         1:A:167:SER:C         1:A:168:GLN:N         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         7         3.37           (1,201)         1:A:167:SER:C         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:2168:GLN:C         16         3.37           (1,201)         1:A:167:SER:C         1:A:168:GLN:N         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         7         3.37           (1,201)         1:A:26:GLU:N         1:A:29:ARG:N         1:A:216:GLU:N         1:A:29:ARG:N         1:A:216:GLU:N         1         3.37           (1,301)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:AR	· · /	1:A:51:PHE:C				6	
(1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         16         3.42           (1,16)         1:A:14:ARG:N         1:A:14:ARG:CA         1:A:14:ARG:C         1:A:15:THR:N         3         3.42           (1,201)         1:A:167:SER:C         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:168:GLN:C         7         3.38           (1,34)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         7         3.37           (1,201)         1:A:167:SER:C         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:168:GLN:C         16         3.37           (1,201)         1:A:167:SER:C         1:A:168:GLN:N         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         7         3.37           (1,201)         1:A:169:GLU:N         1:A:26:GLU:CA         1:A:26:GLU:CA         1:A:496:GLU:CA         1:A:497:VAL:N         1         3.37           (1,104)         1:A:29:GLU:N         1:A:29:ARG:N         1:A:29:ARG:CA         1:A:29:ARG:CA         1:A:29:ARG:CA         1:A:29:ARG:CA         2:A:29:ARG:CA         1:A:29:ARG:CA         1:A:27:ARG:N         12         3.36           (1,34)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:28:ARG:CA         1:A:28:ARG:CA         1:A:38:ARG:CA <th< td=""><td>· /</td><td></td><td>1:A:169:GLU:N</td><td>1:A:169:GLU:CA</td><td></td><td>8</td><td></td></th<>	· /		1:A:169:GLU:N	1:A:169:GLU:CA		8	
(1,16)         1:A:14:ARG:N         1:A:14:ARG:CA         1:A:14:ARG:C         1:A:15:THR:N         3         3.42           (1,201)         1:A:167:SER:C         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:168:GLN:C         7         3.38           (1,34)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         7         3.37           (1,201)         1:A:167:SER:C         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:4168:GLN:C         16         3.37           (1,201)         1:A:167:SER:C         1:A:168:GLN:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:29:ARG:CA         1:A:497:VAL:N         1         3.37           (1,30)         1:A:28:GLN:C         1:A:29:ARG:N         1:A:29:ARG:CA         1:A:29:ARG:C         2         3.36           (1,39)         1:A:28:GLN:C         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         12         3.36           (1,34)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         12         3.36           (1,34)         1:A:28:GLN:N         1:A:28:ARG:C         1:A:28:ILE:C         1:A:28:ILE:C         12         3.35           (1,65)         1:A:31:PHE:C         1:A:25:ILE:N         1:A:25:ILE:CA         1:A:28:GLN:N </td <td>( / /</td> <td>1:A:10:ALA:C</td> <td>1:A:11:LEU:N</td> <td>1:A:11:LEU:CA</td> <td>1:A:11:LEU:C</td> <td>16</td> <td></td>	( / /	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	16	
(1,201)         1:A:167:SER:C         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:168:GLN:C         7         3.38           (1,34)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         7         3.37           (1,201)         1:A:167:SER:C         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:168:GLN:C         16         3.37           (1,104)         1:A:96:GLU:N         1:A:29:ARG:N         1:A:29:ARG:CA         1:A:29:ARG:C         16         3.37           (1,39)         1:A:29:ARG:N         1:A:29:ARG:CA         1:A:29:ARG:C         2         3.36           (1,34)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         12         3.36           (1,34)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         12         3.36           (1,38)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:C         1:A:33:LEU:N         12         3.35           (1,65)         1:A:51:PHE:C         1:A:52:ILE:N         1:A:52:ILE:CA         1:A:52:ILE:C         14         3.28           (1,36)         1:A:27:ARG:N         1:A:27:ARG:CA         1:A:28:GLN:N         5         3.28           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N	( ' /	1:A:14:ARG:N	1:A:14:ARG:CA	1:A:14:ARG:C	1:A:15:THR:N	3	3.42
(1,34)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         7         3.37           (1,201)         1:A:167:SER:C         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:168:GLN:C         16         3.37           (1,104)         1:A:96:GLU:N         1:A:96:GLU:CA         1:A:97:VAL:N         1         3.37           (1,39)         1:A:28:GLN:C         1:A:29:ARG:N         1:A:29:ARG:CA         1:A:29:ARG:C         2         3.36           (1,34)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         12         3.36           (1,88)         1:A:82:ARG:N         1:A:82:ARG:CA         1:A:82:ARG:C         1:A:83:LEU:N         12         3.35           (1,65)         1:A:51:PHE:C         1:A:52:ILE:N         1:A:52:ILE:CA         1:A:52:ILE:C         14         3.28           (1,36)         1:A:27:ARG:N         1:A:27:ARG:CA         1:A:27:ARG:C         1:A:28:GLN:N         5         3.28           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         7         3.27           (1,59)         1:A:45:ASN:C         1:A:46:ARG:N         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:C         18         3.26					1:A:168:GLN:C	7	
(1,201)         1:A:167:SER:C         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:168:GLN:C         16         3.37           (1,104)         1:A:96:GLU:N         1:A:96:GLU:CA         1:A:96:GLU:C         1:A:97:VAL:N         1         3.37           (1,39)         1:A:28:GLN:C         1:A:29:ARG:N         1:A:29:ARG:CA         1:A:29:ARG:C         2         3.36           (1,34)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         12         3.36           (1,88)         1:A:82:ARG:N         1:A:82:ARG:CA         1:A:82:ARG:C         1:A:83:LEU:N         12         3.35           (1,65)         1:A:51:PHE:C         1:A:52:ILE:N         1:A:52:ILE:CA         1:A:52:ILE:C         14         3.28           (1,36)         1:A:27:ARG:N         1:A:27:ARG:CA         1:A:27:ARG:C         1:A:28:GLN:N         5         3.28           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         7         3.27           (1,59)         1:A:45:ASN:C         1:A:46:ARG:N         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:C         18         3.26           (1,29)         1:A:23:SER:C         1:A:24:ILE:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:46:ARG:C         13         3.2	· · /			1:A:26:ILE:C		7	
(1,104)         1:A:96:GLU:N         1:A:96:GLU:CA         1:A:96:GLU:C         1:A:97:VAL:N         1         3.37           (1,39)         1:A:28:GLN:C         1:A:29:ARG:N         1:A:29:ARG:CA         1:A:29:ARG:C         2         3.36           (1,34)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         12         3.36           (1,88)         1:A:82:ARG:N         1:A:82:ARG:CA         1:A:82:ARG:C         1:A:83:LEU:N         12         3.35           (1,65)         1:A:51:PHE:C         1:A:52:ILE:N         1:A:52:ILE:CA         1:A:52:ILE:C         14         3.28           (1,36)         1:A:27:ARG:N         1:A:27:ARG:CA         1:A:27:ARG:C         1:A:28:GLN:N         5         3.28           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         7         3.27           (1,59)         1:A:45:ASN:C         1:A:46:ARG:N         1:A:46:ARG:C         18         3.26           (1,29)         1:A:23:SER:C         1:A:24:ILE:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:24:ILE:C         11         3.25           (1,120)         1:A:104:GLU:N         1:A:104:GLU:C         1:A:13:ARG:N         15         3.22           (1,100)         1	, ,					16	
(1,39)         1:A:28:GLN:C         1:A:29:ARG:N         1:A:29:ARG:CA         1:A:29:ARG:C         2         3.36           (1,34)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         12         3.36           (1,88)         1:A:82:ARG:N         1:A:82:ARG:CA         1:A:82:ARG:C         1:A:83:LEU:N         12         3.35           (1,65)         1:A:51:PHE:C         1:A:52:ILE:N         1:A:52:ILE:CA         1:A:52:ILE:C         14         3.28           (1,36)         1:A:27:ARG:N         1:A:27:ARG:CA         1:A:27:ARG:C         1:A:28:GLN:N         5         3.28           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         7         3.27           (1,59)         1:A:45:ASN:C         1:A:46:ARG:N         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:C         18         3.26           (1,29)         1:A:23:SER:C         1:A:24:ILE:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:24:ILE:C         11         3.25           (1,120)         1:A:104:GLU:N         1:A:104:GLU:CA         1:A:105:GLY:N         2         3.24           (1,12)         1:A:88:VAL:N         1:A:88:VAL:CA         1:A:88:VAL:C         1:A:89:TYR:N         2         3.22	· · /					1	
(1,34)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         12         3.36           (1,88)         1:A:82:ARG:N         1:A:82:ARG:CA         1:A:82:ARG:C         1:A:83:LEU:N         12         3.35           (1,65)         1:A:51:PHE:C         1:A:52:ILE:N         1:A:52:ILE:CA         1:A:52:ILE:C         14         3.28           (1,36)         1:A:27:ARG:N         1:A:27:ARG:CA         1:A:27:ARG:C         1:A:28:GLN:N         5         3.28           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         7         3.27           (1,59)         1:A:45:ASN:C         1:A:46:ARG:N         1:A:46:ARG:C         18         3.26           (1,29)         1:A:23:SER:C         1:A:24:ILE:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:24:ILE:C         11         3.25           (1,120)         1:A:104:GLU:N         1:A:104:GLU:CA         1:A:104:GLU:C         1:A:105:GLY:N         2         3.24           (1,12)         1:A:88:VAL:N         1:A:88:VAL:CA         1:A:88:VAL:C         1:A:89:TYR:N         2         3.22	,		1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA		2	
(1,88)         1:A:82:ARG:N         1:A:82:ARG:CA         1:A:82:ARG:C         1:A:83:LEU:N         12         3.35           (1,65)         1:A:51:PHE:C         1:A:52:ILE:N         1:A:52:ILE:CA         1:A:52:ILE:C         14         3.28           (1,36)         1:A:27:ARG:N         1:A:27:ARG:C         1:A:28:GLN:N         5         3.28           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         7         3.27           (1,59)         1:A:45:ASN:C         1:A:46:ARG:N         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:C         18         3.26           (1,29)         1:A:23:SER:C         1:A:24:ILE:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:24:ILE:C         11         3.25           (1,120)         1:A:104:GLU:N         1:A:104:GLU:CA         1:A:105:GLY:N         2         3.24           (1,12)         1:A:12:GLY:N         1:A:12:GLY:CA         1:A:13:ARG:N         15         3.22           (1,100)         1:A:88:VAL:N         1:A:88:VAL:CA         1:A:88:VAL:C         1:A:89:TYR:N         2         3.22	/				1:A:27:ARG:N	12	
(1,65)         1:A:51:PHE:C         1:A:52:ILE:N         1:A:52:ILE:CA         1:A:52:ILE:C         14         3.28           (1,36)         1:A:27:ARG:N         1:A:27:ARG:CA         1:A:27:ARG:C         1:A:28:GLN:N         5         3.28           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         7         3.27           (1,59)         1:A:45:ASN:C         1:A:46:ARG:N         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:C         18         3.26           (1,29)         1:A:23:SER:C         1:A:24:ILE:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:24:ILE:C         11         3.25           (1,120)         1:A:104:GLU:N         1:A:104:GLU:CA         1:A:104:GLU:C         1:A:105:GLY:N         2         3.24           (1,12)         1:A:12:GLY:N         1:A:12:GLY:CA         1:A:13:ARG:N         15         3.22           (1,100)         1:A:88:VAL:N         1:A:88:VAL:CA         1:A:88:VAL:C         1:A:89:TYR:N         2         3.22	/		1:A:82:ARG:CA			12	
(1,36)         1:A:27:ARG:N         1:A:27:ARG:CA         1:A:27:ARG:C         1:A:28:GLN:N         5         3.28           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         7         3.27           (1,59)         1:A:45:ASN:C         1:A:46:ARG:N         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:C         18         3.26           (1,29)         1:A:23:SER:C         1:A:24:ILE:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:24:ILE:C         11         3.25           (1,120)         1:A:104:GLU:N         1:A:104:GLU:CA         1:A:104:GLU:C         1:A:105:GLY:N         2         3.24           (1,12)         1:A:12:GLY:N         1:A:12:GLY:CA         1:A:12:GLY:C         1:A:13:ARG:N         15         3.22           (1,100)         1:A:88:VAL:N         1:A:88:VAL:CA         1:A:88:VAL:C         1:A:89:TYR:N         2         3.22	_ ,						
(1,9)       1:A:10:ALA:C       1:A:11:LEU:N       1:A:11:LEU:CA       1:A:11:LEU:C       7       3.27         (1,59)       1:A:45:ASN:C       1:A:46:ARG:N       1:A:46:ARG:CA       1:A:46:ARG:C       18       3.26         (1,29)       1:A:23:SER:C       1:A:24:ILE:N       1:A:24:ILE:CA       1:A:24:ILE:C       11       3.25         (1,120)       1:A:104:GLU:N       1:A:104:GLU:CA       1:A:104:GLU:C       1:A:105:GLY:N       2       3.24         (1,12)       1:A:12:GLY:N       1:A:12:GLY:CA       1:A:12:GLY:C       1:A:13:ARG:N       15       3.22         (1,100)       1:A:88:VAL:N       1:A:88:VAL:CA       1:A:88:VAL:C       1:A:89:TYR:N       2       3.22	· · /						
(1,59)         1:A:45:ASN:C         1:A:46:ARG:N         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:C         18         3.26           (1,29)         1:A:23:SER:C         1:A:24:ILE:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:24:ILE:C         11         3.25           (1,120)         1:A:104:GLU:N         1:A:104:GLU:CA         1:A:104:GLU:C         1:A:105:GLY:N         2         3.24           (1,12)         1:A:12:GLY:N         1:A:12:GLY:CA         1:A:12:GLY:C         1:A:13:ARG:N         15         3.22           (1,100)         1:A:88:VAL:N         1:A:88:VAL:CA         1:A:88:VAL:C         1:A:89:TYR:N         2         3.22	_ ,						
(1,29)       1:A:23:SER:C       1:A:24:ILE:N       1:A:24:ILE:CA       1:A:24:ILE:C       11       3.25         (1,120)       1:A:104:GLU:N       1:A:104:GLU:CA       1:A:104:GLU:C       1:A:105:GLY:N       2       3.24         (1,12)       1:A:12:GLY:N       1:A:12:GLY:CA       1:A:12:GLY:C       1:A:13:ARG:N       15       3.22         (1,100)       1:A:88:VAL:N       1:A:88:VAL:CA       1:A:88:VAL:C       1:A:89:TYR:N       2       3.22					1:A:46:ARG:C		
(1,120)       1:A:104:GLU:N       1:A:104:GLU:CA       1:A:104:GLU:C       1:A:105:GLY:N       2       3.24         (1,12)       1:A:12:GLY:N       1:A:12:GLY:CA       1:A:12:GLY:C       1:A:13:ARG:N       15       3.22         (1,100)       1:A:88:VAL:N       1:A:88:VAL:CA       1:A:88:VAL:C       1:A:89:TYR:N       2       3.22	· · /						
(1,12)       1:A:12:GLY:N       1:A:12:GLY:CA       1:A:12:GLY:C       1:A:13:ARG:N       15       3.22         (1,100)       1:A:88:VAL:N       1:A:88:VAL:CA       1:A:88:VAL:C       1:A:89:TYR:N       2       3.22	· · /	1:A:104:GLU:N	1:A:104:GLU:CA	1:A:104:GLU:C	1:A:105:GLY:N	2	3.24
(1,100) 1:A:88:VAL:N 1:A:88:VAL:CA 1:A:88:VAL:C 1:A:89:TYR:N 2 3.22	\ ' '	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	1:A:13:ARG:N	15	3.22
	· · /	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:TYR:N	2	3.22
	· · /	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	4	3.21



Atom-4   Atom-3   Atom-3   Atom-4   Model   Violation (c)		ed from previous p	•				
1.3.15	Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation $(\circ)$
(1,134)   1:A:140LE.N   1:A:140.H.E.CA   1:A:140.H.E.C   1:A:141.R.G.N   1   3.16   (1,134)   1:A:142.L.EU.N   1:A:142.L.EU.C   1:A:142.L.EU.C   1:A:13.G.U.N   12   3.15   (1,244)   1:A:142.L.EU.N   1:A:142.L.EU.C   1:A:142.L.EU.C   1:A:175.ALAN   6   3.14   (1,238)   1:A:28.G.N.N   1:A:28.G.N.C   1:A:29.ARG.N   2   3.12   (1,34)   1:A:26.L.E.N   1:A:24.L.A.CA   1:A:21.ALA.C   1:A:22.ARG.N   6   3.05   (1,36)   1:A:41.4.H.S.N   1:A:21.L.A.CA   1:A:21.ALA.C   1:A:22.ARG.N   6   3.05   (1,37)   1:A:27.ARG.C   1:A:28.G.N.N   1:A:28.G.N.C   1:A:28.G.N.C   1:A:28.G.N.N   1:A:28.G.N.C   1:A:36.G.N.C   1:A:28.G.N.C   1:A:36.G.N.C   1	( ' /						
(1,134)   1.A.1124EUEN   1.A.1124EUEVA   1.A.1124EUEVC   1.A.1134EUEN   12   3.15   (1,214)   1.A.124EUEN   1.A.124EUEVA   1.A.124EUEVA   1.A.124EUEVA   1.A.124EUEVA   1.A.126EUEVA   1	( / /					1	
(1.214)   1.A.174-TRP.N   1.A.174-TRP.CA   1.A.174-TRP.C   1.A.175-TALA.N   6   3.14     (1.38)   1.A.28-GLNN   1.A.28-GLNCA   1.A.28-GLNC   1.A.29-ARGN   2   3.12     (1.34)   1.A.26-HLEN   1.A.26-HLECA   1.A.26-HLEC   1.A.27-ARGN   2   3.05     (1.26)   1.A.21-ALA.N   1.A.21-ALA.CA   1.A.22-HLE.C   1.A.27-ARGN   2   3.05     (1.37)   1.A.21-ALA.N   1.A.21-ALA.CA   1.A.22-HLE.C   1.A.27-ARGN   6   3.05     (1.37)   1.A.21-ALA.N   1.A.21-ALA.CA   1.A.22-HLE.C   1.A.27-ARGN   6   3.05     (1.37)   1.A.27-ARGC   1.A.28-GLNN   1.A.28-GLNC   1.A.28-GLNC   19   3.0     (1.96)   1.A.36-SFR.C   1.A.38-SFR.C   1.A.38-SF	· · /						
(1,34)   1:A-28-GINN   1:A-28-GIN:CA   1:A-28-GIN:C   1:A-29-ARG:N   2   3.12     (1,34)   1:A-26-TIEN   1:A-26-	· · /						
(1.36)   1:A.2:GILEN	(1,214)	1:A:174:TRP:N	1:A:174:TRP:CA	1:A:174:TRP:C	1:A:175:ALA:N		3.14
(1,26)   1A-21-ALAN   1-A-21-ALA-CA   1-A-21-ALA-C   1-A-22-ARGN   6   3.05   (1,138)   1A-114-HIS.N   1-A-114-HIS.CA   1-A-114-HIS.C   1-A-115-ALAN   2   3.03   (1,96)   1-A-25-ARG-C   1-A-28-GIN.N   1-A-28-GIN.CA   1-A-28-GIN.C   19   3.0   (1,96)   1-A-36-SER.N   1-A-36-SER.CA   1-A-36-SER.C   1-A-37-TRP.N   2   2.96   (1,65)   1-A-31-PHIEC   1-A-35-2-HE.CA   1-A-32-HE.CA   1-A-32-HE.CA   1-A-32-HE.CA   (1,00)   1-A-38-VAL.N   1-A-38-VAL.CA   1-A-32-HE.CA   1-A-32-HE.C   16   2.94   (1,100)   1-A-38-VAL.N   1-A-38-VAL.CA   1-A-32-HE.CA   1-A-32-HE.C   16   2.94   (1,100)   1-A-38-VAL.N   1-A-38-VAL.CA   1-A-32-HE.CA   1-A-32-HE.C   16   2.94   (1,136)   1-A-113-GI.U-C   1-	(1,38)	1:A:28:GLN:N	1:A:28:GLN:CA	1:A:28:GLN:C	1:A:29:ARG:N	2	3.12
(1,37)   1:A:27:ARG:C   1:A:28:GLN:N   1:A:28:GLN:C   1:A:28:GLN:C   19   3.0     (1,37)   1:A:27:ARG:C   1:A:28:GLN:N   1:A:28:GLN:C   1:A:28:GLN:C   19   3.0     (1,96)   1:A:86:SER:N   1:A:86:SER:C   1:A:85:TRP:N   2   2.96     (1,82)   1:A:76:ARG:N   1:A:76:ARG:C   1:A:38:TRP:N   2   2.96     (1,65)   1:A:51:PHE:C   1:A:52:ILE:N   1:A:25:ILE:C   16   2.94     (1,100)   1:A:88:VAL:N   1:A:88:VAL:C   1:A:88:VAL:C   1:A:89:TYR:N   20   2.94     (1,100)   1:A:88:VAL:N   1:A:88:VAL:C   1:A:88:VAL:C   1:A:89:TYR:N   20   2.94     (1,136)   1:A:113:GLU:N   1:A:113:GLU:C   1:A:113:GLU:	(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	20	3.05
(1,37)	(1,26)	1:A:21:ALA:N	1:A:21:ALA:CA	1:A:21:ALA:C	1:A:22:ARG:N	6	3.05
(1,96)	(1,138)	1:A:114:HIS:N	1:A:114:HIS:CA	1:A:114:HIS:C	1:A:115:ALA:N	2	3.03
(1,82)	(1,37)	1:A:27:ARG:C	1:A:28:GLN:N	1:A:28:GLN:CA	1:A:28:GLN:C	19	3.0
(1,65)	(1,96)	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	2	2.96
(1,100    1:A:88:VAL:N	(1,82)	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	1:A:77:CYS:N	2	2.96
(1,136)   1.A:113:GLUN   1.A:113:GLUCA   1.A:113:GLUC   1.A:114:HIS:N   19   2.93   (1,164)   1.A:128:GLYN   1.A:128:GLYCA   1.A:128:GLYC   1.A:129:TRP:N   12   2.92   (1,136)   1.A:113:GLUN   1.A:113:GLUC   1.A:114:HIS:N   2   2.9   (1,124)   1.A:107:GLYN   1.A:107:GLYCA   1.A:107:GLYC   1.A:108:THR:N   8   2.9   (1,39)   1.A:28:GLNC   1.A:29:ARG:CA   1.A:29:ARG:C   17   2.85   (1,88)   1.A:88:GLNC   1.A:29:ARG:CA   1.A:29:ARG:C   17   2.85   (1,88)   1.A:88:GLNC   1.A:88:GLUCA   1.A:86:GLUC   1.A:94:ARG:N   7   2.83   (1,4)   1.A:86:GLUN   1.A:86:GLUCA   1.A:86:GLUC   1.A:94:ARG:N   17   2.82   (1,59)   1.A:45:ASN:C   1.A:46:ARG:CA   1.A:46:ARG:CA   1.A:29:ARG:N   17   2.82   (1,26)   1.A:45:ASN:C   1.A:46:ARG:CA   1.A:46:ARG:CA   1.A:29:ARG:N   1   2.8   (1,201)   1.A:167:SER:C   1.A:168:GLN:N   1.A:168:GLN:CA   1.A:168:GLN:C   12   2.8   (1,201)   1.A:167:SER:C   1.A:168:GLN:N   1.A:168:GLN:CA   1.A:168:GLN:C   12   2.8   (1,36)   1.A:27:ARG:N   1.A:27:ARG:CA   1.A:28:ALC:CA   1.A:28:A	(1,65)	1:A:51:PHE:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	16	2.94
(1,164)         1:A:128:GLY:N         1:A:128:GLY:C         1:A:129:TRP:N         12         2.92           (1,134)         1:A:113:GLUN         1:A:113:GLUN         1:A:113:GLUNC         1:A:113:GLUNC         1:A:114:HIBSN         2         2.9           (1,34)         1:A:107:GLY:N         1:A:107:GLY:N         1:A:108:THIRN         8         2.9           (1,39)         1:A:28:GLN:C         1:A:29:ARG:N         1:A:29:ARG:C         1:A:29:ARG:C         1:A:29:ARG:C         17         2.83           (1,4)         1:A:38:GLU:N         1:A:38:GLU:C         1:A:38:ARG:C         1:A:38:ARG:C         17         2.83           (1,4)         1:A:38:GLU:N         1:A:36:ARG:N         1:A:46:ARG:C         1:A:38:ARG:N         17         2.83           (1,4)         1:A:35:ASN:C         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:C         1         2.82           (1,5)         1:A:47:ALA:N         1:A:46:ARG:N         1         2.82           (1,201)         1:A:16:ARG:CA         1:A:46:ARG:CA         1:A:42:ARG:N         1         2.8           (1,201)         1:A:16:ARG:CA         1:A:21:ARG:C         1:A:14:ARG:CA         1:A:21:ARG:CA         1:A:42:ARG:CA         1:A:42:ARG:CA         1:A:42:ARG:CA         1:A:46:PHE:C         1:A:64:PHE:C	(1,100)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:TYR:N	20	2.94
(1,136)	(1,136)	1:A:113:GLU:N	1:A:113:GLU:CA	1:A:113:GLU:C	1:A:114:HIS:N	19	2.93
(1,124)   1:A:107:GLY:N   1:A:107:GLY:CA   1:A:107:GLY:C   1:A:108:THR:N   8   2.9	(1,164)	1:A:128:GLY:N	I .		1:A:129:TRP:N	12	2.92
(1,39) 1:A:28:GLN:C 1:A:29:ARG:N 1:A:29:ARG:C 1:A:29:ARG:C 17 2.85 (1,88) 1:A:82:ARG:N 1:A:82:ARG:C 1:A:83:LEU:N 7 2.83 (1,4) 1:A:86:GLN:N 1:A:86:LU:C 1:A:83:LEU:N 7 2.82 (1,59) 1:A:45:ASN:C 1:A:46:ARG:N 1:A:86:LU:C 1:A:9:ARG:N 17 2.82 (1,59) 1:A:45:ASN:C 1:A:46:ARG:N 1:A:46:ARG:C 1:A:46:ARG:C 7 2.81 (1,26) 1:A:21:ALA:N 1:A:21:ALA:CA 1:A:21:ALA:C 1:A:22:ARG:N 1 2.8 (1,201) 1:A:167:SER:C 1:A:168:GLN:N 1:A:168:GLN:C 12 2.8 (1,65) 1:A:21:ALA:N 1:A:21:ALA:CA 1:A:21:ALA:C 1:A:22:ARG:N 1 2.8 (1,65) 1:A:21:ALA:N 1:A:27:ARG:C 1:A:168:GLN:C 12 2.8 (1,65) 1:A:27:ARG:N 1:A:27:ARG:C 1:A:25:LLE:C 15 2.79 (1,36) 1:A:27:ARG:N 1:A:27:ARG:C 1:A:27:ARG:C 1:A:28:GLN:N 4 2.79 (1,33) 1:A:27:ARG:N 1:A:27:ARG:C 1:A:27:ARG:C 1:A:28:GLN:N 4 2.79 (1,33) 1:A:11:GLU:N 1:A:111:GLU:C 1:A:111:GLU:C 1:A:111:GLU:N 10 2.79 (1,73) 1:A:63:ASN:C 1:A:64:PHE:N 1:A:64:PHE:C 1 C 2.78 (1,100) 1:A:38:VAL:N 1:A:88:VAL:C 1:A:64:PHE:C 0 C 2.78 (1,16) 1:A:44:ARG:N 1:A:44:ARG:CA 1:A:44:ARG:C 1:A:45:THR:N 12 2.78 (1,16) 1:A:44:LB:CN 1:A:24:LB:CA 1:A:46:ARG:C 1:A:15:THR:N 14 2.76 (1,75) 1:A:64:PHE:C 1:A:65:ALA:N 1:A:65:ALA:N 1:A:65:ALA:C 16 2.74 (1,30) 1:A:24:LB:N 1:A:24:LB:CA 1:A:25:LB:N 4 2.71 (1,80) 1:A:75:LB:N 1:A:24:LB:CA 1:A:42:LB:CA 1:A:25:LB:N 4 2.71 (1,80) 1:A:15:LB:N 1:A:24:LB:CA 1:A:169:GLU:C 1:A:169:GLU:C 17 2.67 (1,26) 1:A:24:LB:N 1:A:24:LB:CA 1:A:25:LB:N 4 2.71 (1,80) 1:A:163:GLN:C 1:A:169:GLU:N 1:A:169:GLU:C 1:A:169:GLU:C 17 2.67 (1,26) 1:A:23:SBR:C 1:A:24:LB:N 1:A:24:LB:CA 1:A:25:ABR:N 10 2.68 (1,203) 1:A:168:GLN:C 1:A:169:GLU:N 1:A:169:GLU:C 1:A:169:GLU:C 17 2.67 (1,26) 1:A:23:SBR:C 1:A:24:LB:N 1:A:24:LB:C 1:A:24:LB:C 1 1:A:24:LB:C 1 1:A:25:LB:N 4 2.71 (1,29) 1:A:19:ABR:N 1:A:24:LB:N 1:A:24:LB:C 1 1:A:24:LB:C 1 1:A:24:LB:C 1 1:A:24:LB:C 1 1:A:25:LB:N 4 2.65 (1,29) 1:A:18:GLU:N 1:A:8:GLU:N 1:A:8:GLU:N 1:A:18:GLU:C 1 1:A:18:GLU:C 1 1:A:18:GLU:C 1 1:A:18:GLU:C 1 1:A:24:LB:C 1 1:A:24:LB:C 1 1:A:25:LB:N 4 2.65 (1,29) 1:A:18:GLU:C 1 1:A:18:GLU:C 1 1:A:18:GLU:C 1 1:A:24:LB:C 1 1:A:25:LB:N 7 2.56 (1,29) 1:A:18:GLU:C 1 1:A:24:LB:C 1 1:A:24:LB:C 1 1:A:2	(1,136)	1:A:113:GLU:N	1:A:113:GLU:CA	1:A:113:GLU:C	1:A:114:HIS:N	2	2.9
(1,88)   1:A:82:ARG:N   1:A:82:ARG:CA   1:A:82:ARG:C   1:A:83:LEU:N   7   2.83     (1,4)   1:A:8:GLU:N   1:A:8:GLU:CA   1:A:8:GLU:C   1:A:9:ARG:N   17   2.82     (1,59)   1:A:45:ASN:C   1:A:46:ARG:N   1:A:46:ARG:CA   1:A:46:ARG:C   7   2.81     (1,26)   1:A:45:ASN:C   1:A:46:ARG:N   1:A:46:ARG:CA   1:A:46:ARG:N   1   2.8     (1,201)   1:A:167:SER:C   1:A:168:GLN:N   1:A:168:GLN:CA   1:A:168:GLN:C   12   2.8     (1,65)   1:A:51:PHE:C   1:A:52:ILE:N   1:A:52:ILE:CA   1:A:52:ILE:C   15   2.79     (1,36)   1:A:27:ARG:N   1:A:27:ARG:CA   1:A:52:ILE:CA   1:A:52:ILE:N   4   2.79     (1,36)   1:A:111:GLU:N   1:A:111:GLU:CA   1:A:111:GLU:C   1:A:12:LEU:N   10   2.79     (1,73)   1:A:63:ASN:C   1:A:64:PHE:N   1:A:64:PHE:CA   1:A:65:ALA:N   1:A:65:ALA:N   1:A:65:ALA:CA   1:A:16:G:ALA:CA   1:A:16:G:ALA:	(1,124)	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	1:A:108:THR:N	8	2.9
(1,4) 1:A:8:GLU:N 1:A:8:GLU:CA 1:A:8:GLU:C 1:A:9:ARG:N 17 2.82 (1,59) 1:A:45:ASN:C 1:A:46:ARG:N 1:A:46:ARG:CA 1:A:46:ARG:CC 7 2.81 (1,26) 1:A:21:ALA:N 1:A:21:ALA:CA 1:A:21:ALA:C 1:A:22:ARG:N 1 2.8 (1,201) 1:A:167:SER:C 1:A:168:GLN:N 1:A:168:GLN:C 1:A:22:ARG:N 1 2.8 (1,65) 1:A:51:PHE:C 1:A:52:ILE:N 1:A:52:ILE:CA 1:A:52:ILE:C 15 2.79 (1,36) 1:A:27:ARG:N 1:A:11:GU:C 1:A:52:ILE:CA 1:A:52:ILE:C 15 2.79 (1,36) 1:A:27:ARG:N 1:A:111:GLU:CA 1:A:111:GLU:C 1:A:111:GLU:C 10 2.79 (1,73) 1:A:63:ASN:C 1:A:64:PHE:N 1:A:64:PHE:CA 1:A:111:GLU:C 1:A:111:GLU:C 1.2 2.8 (1,100) 1:A:88:VAL:N 1:A:88:VAL:CA	(1,39)	1:A:28:GLN:C	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	17	2.85
(1,59) 1:A:45:ASN:C 1:A:46:ARG:N 1:A:46:ARG:C 1:A:46:ARG:C 7 2.81 (1,26) 1:A:21:ALA:N 1:A:21:ALA:C 1:A:21:ALA:C 1:A:22:ARG:N 1 2.8 (1,201) 1:A:67:SER:C 1:A:168:GLN:N 1:A:168:GLN:C 1:A:168:GLN:C 12 2.8 (1,65) 1:A:167:SER:C 1:A:168:GLN:N 1:A:168:GLN:C 1:A:168:GLN:C 15 2.79 (1,36) 1:A:27:ARG:N 1:A:52:ILE:N 1:A:52:ILE:C 15 2.79 (1,36) 1:A:27:ARG:N 1:A:27:ARG:C 1:A:28:GLN:N 4 2.79 (1,38) 1:A:11:GLU:N 1:A:111:GLU:C 1:A:111:GLU:C 1:A:112:LEU:N 10 2.79 (1,73) 1:A:63:ASN:C 1:A:64:PHE:N 1:A:64:PHE:C 1:A:64:PHE:C 6 2.78 (1,100) 1:A:88:VAL:N 1:A:88:VAL:CA 1:A:64:PHE:C 1:A:64:PHE:C 6 2.78 (1,100) 1:A:46:PHE:C 1:A:46:AA:N 1:A:65:ALA:CA 1:A:65:ALA:C 16 2.78 (1,15) 1:A:64:PHE:C 1:A:24:ILE:C 15 2.79 (1,75) 1:A:64:PHE:C 1:A:65:ALA:N 1:A:65:ALA:CA 1:A:65:ALA:C 16 2.74 (1,30) 1:A:24:ILE:N 1:A:75:LEU:CA 1:A:65:ALA:CA 1:A:65:ALA:C 16 2.74 (1,30) 1:A:24:ILE:N 1:A:75:LEU:CA 1:A:65:ALA:CA 1:A:65:ALA:C 16 2.74 (1,30) 1:A:24:ILE:N 1:A:75:LEU:CA 1:A:75:LEU:C 1:A:76:ARG:N 10 2.68 (1,203) 1:A:168:GLN:C 1:A:169:GLU:N 1:A:169:GLU:CA 1:A:169:GLU:C 17 2.67 (1,26) 1:A:21:ALA:N 1:A:21:ALA:CA 1:A:21:ALA:C 1:A:22:ARG:N 4 2.65 (1,29) 1:A:10:ALA:C 1:A:11:LEU:N 1:A:11:LEU:N 1:A:11:LEU:CA 1:A:11:LEU:C 12 2.64 (1,29) 1:A:23:SER:C 1:A:24:ILE:N 1:A:24:ILE:CA 1:A:24:ILE:C 18 2.63 (1,4) 1:A:28:GLU:N 1:A:83:LEU:CA 1:A:28:GLU:C 1:A:9:ARG:N 5 2.62 (1,90) 1:A:83:LEU:N 1:A:83:LEU:CA 1:A:24:ILE:CA 1:A:24:ILE:C 18 2.63 (1,4) 1:A:8:GLU:N 1:A:83:LEU:CA 1:A:24:ILE:C 18 2.65 (1,90) 1:A:83:LEU:N 1:A:83:LEU:CA 1:A:24:ILE:C 18 2.65 (1,90) 1:A:83:LEU:N 1:A:83:LEU:CA 1:A:24:ILE:C 18 2.65 (1,90) 1:A:83:LEU:N 1:A:83:LEU:CA 1:A:24:ILE:N 1 1:A:26:ILE:N 1 1	(1,88)	1:A:82:ARG:N	1:A:82:ARG:CA	1:A:82:ARG:C	1:A:83:LEU:N	7	2.83
(1,26)	(1,4)	1:A:8:GLU:N	1:A:8:GLU:CA	1:A:8:GLU:C	1:A:9:ARG:N	17	2.82
(1,201)         1:A:167:SER:C         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:168:GLN:C         12         2.8           (1,65)         1:A:51:PHE:C         1:A:52:ILE:N         1:A:52:ILE:CA         1:A:52:ILE:C         15         2.79           (1,36)         1:A:27:ARG:N         1:A:27:ARG:CA         1:A:27:ARG:C         1:A:28:GLN:N         4         2.79           (1,132)         1:A:111:GLU:N         1:A:111:GU:CA         1:A:111:GU:C         1:A:112:LEU:N         10         2.79           (1,73)         1:A:63:ASN:C         1:A:64:PHE:N         1:A:64:PHE:CA         1:A:64:PHE:C         6         2.78           (1,100)         1:A:88:VAL:N         1:A:88:VAL:CA         1:A:88:VAL:C         1:A:89:TYR:N         12         2.78           (1,101)         1:A:14:ARG:N         1:A:14:ARG:CA         1:A:14:ARG:C         1:A:15:THE:N         14         2.76           (1,75)         1:A:64:PHE:C         1:A:65:ALA:N         1:A:65:ALA:CA         1:A:14:ARG:C         1:A:15:THE:N         14         2.76           (1,75)         1:A:68:GLN:C         1:A:24:ILE:CA         1:A:75:LEU:C         1:A:76:ARG:N         10         2.68           (1,203)         1:A:16:B.GU:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:75:LEU:C         1:A:76:ARG:N <td>(1,59)</td> <td>1:A:45:ASN:C</td> <td>1:A:46:ARG:N</td> <td>1:A:46:ARG:CA</td> <td>1:A:46:ARG:C</td> <td>7</td> <td>2.81</td>	(1,59)	1:A:45:ASN:C	1:A:46:ARG:N	1:A:46:ARG:CA	1:A:46:ARG:C	7	2.81
(1,65)         1:A:51:PHE:C         1:A:52:ILE:N         1:A:52:ILE:CA         1:A:52:ILE:C         15         2.79           (1,36)         1:A:27:ARG:N         1:A:27:ARG:CA         1:A:27:ARG:C         1:A:28:GLN:N         4         2.79           (1,36)         1:A:27:ARG:N         1:A:427:ARG:CA         1:A:28:GLN:N         4         2.79           (1,132)         1:A:111:GU:N         1:A:111:GU:CA         1:A:111:GU:C         1:A:111:EU:N         10         2.79           (1,73)         1:A:63:ASN:C         1:A:64:PHE:CA         1:A:64:PHE:CA         1:A:64:PHE:C         6         2.78           (1,100)         1:A:38:VAL:N         1:A:24:CA         1:A:38:VAL:C         1:A:39:TYR:N         12         2.78           (1,16)         1:A:14:ARG:N         1:A:14:ARG:CA         1:A:14:ARG:C         1:A:15:THR:N         14         2.76           (1,75)         1:A:64:PHE:C         1:A:65:ALA:N         1:A:65:ALA:CA         1:A:65:ALA:C         16         2.74           (1,30)         1:A:24:ILE:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:25:ILE:N         4         2.71           (1,75)         1:A:68:GLU:N         1:A:169:GLU:N         1:A:169:GLU:CA         1:A:75:LEU:C         1:A:75:LEU:C         1:A:75:LEU:C         1:A:26:ILE:C	(1,26)	1:A:21:ALA:N	1:A:21:ALA:CA	1:A:21:ALA:C	1:A:22:ARG:N	1	2.8
(1,36) 1:A:27:ARG:N 1:A:27:ARG:CA 1:A:27:ARG:C 1:A:28:GLN:N 4 2.79 (1,132) 1:A:111:GLU:N 1:A:111:GLU:CA 1:A:111:GLU:C 1:A:111:GLU:N 10 2.79 (1,73) 1:A:63:ASN:C 1:A:64:PHE:N 1:A:64:PHE:CA 1:A:64:PHE:C 6 2.78 (1,100) 1:A:88:VAL:N 1:A:88:VAL:CA 1:A:88:VAL:C 1:A:89:TYR:N 12 2.78 (1,16) 1:A:14:ARG:N 1:A:14:ARG:CA 1:A:14:ARG:C 1:A:15:THR:N 14 2.76 (1,75) 1:A:64:PHE:C 1:A:65:ALA:N 1:A:65:ALA:CA 1:A:65:ALA:C 16 2.74 (1,30) 1:A:24:ILE:N 1:A:24:ILE:CA 1:A:24:ILE:C 1:A:25:ILE:N 4 2.71 (1,80) 1:A:75:LEU:N 1:A:75:LEU:CA 1:A:75:LEU:C 1:A:69:GLU:CA 1:A:169:GLU:CA 1:A:169:GLU:C 17 2.67 (1,26) 1:A:21:ALA:C 1:A:169:GLU:CA 1:A:11:LEU:C 12 2.64 (1,29) 1:A:10:ALA:C 1:A:24:ILE:N 1:A:24:ILE:N 1:A:24:ILE:C 12 2.64 (1,29) 1:A:23:SER:C 1:A:24:ILE:N 1:A:24:ILE:CA 1:A:24:ILE:CA 1:A:24:ILE:C 12 2.64 (1,29) 1:A:23:SER:C 1:A:24:ILE:N 1:A:24:ILE:CA 1:A:24:ILE:CA 1:A:24:ILE:C 12 2.64 (1,29) 1:A:23:SER:C 1:A:24:ILE:N 1:A:24:ILE:CA 1:A:24:ILE:C 12 2.64 (1,29) 1:A:23:SER:C 1:A:24:ILE:N 1:A:24:ILE:CA 1:A:24:ILE:C 12 2.64 (1,29) 1:A:23:SER:C 1:A:24:ILE:N 1:A:24:ILE:CA 1:A:24:ILE:C 18 2.63 (1,4) 1:A:83:LEU:N 1:A:83:LEU:CA 1:A:83:LEU:C 1:A:24:ILE:C 18 2.63 (1,4) 1:A:84:GLU:N 1:A:83:LEU:CA 1:A:83:LEU:C 1:A:24:ILE:C 19 2.61 (1,5) 1:A:84:THR:N 1:A:84:THR:CA 1:A:84:THR:N 2 2.61 (1,5) 1:A:84:THR:N 1:A:84:THR:CA 1:A:84:THR:C 1:A:84:THR:N 2 2.61 (1,34) 1:A:26:ILE:N 1:A:26:ILE:CA 1:A:26:ILE:C 1:A:26:ILE:C 19 2.55 (1,20) 1:A:166:GLN:C 1:A:105:GLY:CA 1:A:105:GLY:C 1:A:1	(1,201)	1:A:167:SER:C	1:A:168:GLN:N	1:A:168:GLN:CA	1:A:168:GLN:C	12	2.8
(1,132) 1:A:111:GLU:N 1:A:111:GLU:CA 1:A:111:GLU:C 1:A:112:LEU:N 10 2.79 (1,73) 1:A:63:ASN:C 1:A:64:PHE:N 1:A:64:PHE:CA 1:A:64:PHE:C 6 2.78 (1,100) 1:A:88:VAL:N 1:A:88:VAL:CA 1:A:88:VAL:C 1:A:64:PHE:C 12.78 (1,100) 1:A:88:VAL:N 1:A:88:VAL:CA 1:A:88:VAL:C 1:A:89:TYR:N 12 2.78 (1,16) 1:A:14:ARG:N 1:A:14:ARG:CA 1:A:14:ARG:C 1:A:15:THR:N 14 2.76 (1,75) 1:A:64:PHE:C 1:A:65:ALA:N 1:A:65:ALA:CA 1:A:65:ALA:CA 1:A:65:ALA:C 16 2.74 (1,30) 1:A:24:ILE:CN 1:A:65:ALA:CA 1:A:24:ILE:C 1:A:25:ILE:N 4 2.71 (1,80) 1:A:24:ILE:N 1:A:24:ILE:CA 1:A:24:ILE:C 1:A:25:ILE:N 4 2.71 (1,80) 1:A:168:GLN:C 1:A:169:GLU:N 1:A:169:GLU:CA 1:A:169:GLU:C 17 2.67 (1,26) 1:A:21:ALA:N 1:A:21:ALA:CA 1:A:21:ALA:C 1:A:22:ARG:N 4 2.65 (1,203) 1:A:168:GLN:C 1:A:169:GLU:N 1:A:11:LEU:CA 1:A:11:LEU:C 12 2.64 (1,29) 1:A:23:SER:C 1:A:24:ILE:N 1:A:24:ILE:CA 1:A:24:ILE:C 12 2.64 (1,29) 1:A:23:SER:C 1:A:24:ILE:N 1:A:24:ILE:CA 1:A:24:ILE:C 12 2.64 (1,29) 1:A:23:SER:C 1:A:24:ILE:N 1:A:24:ILE:CA 1:A:24:ILE:C 12 2.64 (1,40) 1:A:8:GLU:N 1:A:8:GLU:CA 1:A:8:GLU:C 1:A:8:GLU:C 1:A:9:ARG:N 5 2.62 (1,90) 1:A:83:LEU:N 1:A:83:LEU:CA 1:A:83:LEU:C 1:A:9:ARG:N 5 2.62 (1,90) 1:A:84:THR:N 1:A:84:THR:CA 1:A:84:THR:N 2 2.61 (1,5) 1:A:8:GLU:N 1:A:86:GLU:CA 1:A:84:THR:C 1:A:85:ILE:N 7 2.56 (1,34) 1:A:26:ILE:N 1:A:26:ILE:CA 1:A:26:ILE:C 1:A:26:ILE:N 7 2.56 (1,34) 1:A:26:ILE:N 1:A:26:ILE:CA 1:A:26:ILE:N 1.A:26:ILE:N 1.A:26:ILE:N 1.A:26:ILE:C 1:A:26:ILE:N 1.A:26:ILE:N 1.A:26:ILE:N 1.A:26:ILE:N 1.A:26:ILE:N 1.A:26:ILE:N 1.A:26:ILE:N 1.A:26:ILE:N 1.A:26:ILE:C 1.A:26:ILE:C 1.A:26:ILE:N 1.A:26:I	(1,65)	1:A:51:PHE:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	15	2.79
(1,73)         1:A:63:ASN:C         1:A:64:PHE:N         1:A:64:PHE:CA         1:A:64:PHE:C         6         2.78           (1,100)         1:A:88:VAL:N         1:A:88:VAL:CA         1:A:88:VAL:C         1:A:89:TYR:N         12         2.78           (1,16)         1:A:14:ARG:N         1:A:14:ARG:CA         1:A:14:ARG:C         1:A:15:THR:N         14         2.76           (1,75)         1:A:64:PHE:C         1:A:65:ALA:CA         1:A:65:ALA:C         16         2.74           (1,30)         1:A:24:ILE:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:65:ALA:CA         1:A:65:ALA:C         16         2.74           (1,80)         1:A:75:LEU:N         1:A:75:LEU:CA         1:A:26:ILE:CA         1:A:69:GLU:C         1:A:26:GAG:N         10         2.68           (1,203)         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1:A:169:GLU:CA         1:A:169:GLU:C         17         2.67           (1,26)         1:A:21:ALA:N         1:A:21:ALA:CA         1:A:21:ALA:C         1:A:22:ARG:N         4         2.65           (1,91)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         12         2.64           (1,29)         1:A:38:GLU:N         1:A:86:GU:CA         1:A:86:GU:C         1:A:99:ARG:N         5         2	(1,36)	1:A:27:ARG:N	1:A:27:ARG:CA	1:A:27:ARG:C	1:A:28:GLN:N	4	2.79
(1,100)         1:A:88:VAL:N         1:A:88:VAL:CA         1:A:88:VAL:C         1:A:89:TYR:N         12         2.78           (1,16)         1:A:14:ARG:N         1:A:14:ARG:CA         1:A:14:ARG:C         1:A:15:THR:N         14         2.76           (1,75)         1:A:64:PHE:C         1:A:65:ALA:N         1:A:65:ALA:CA         1:A:65:ALA:C         16         2.74           (1,30)         1:A:24:ILE:N         1:A:75:LEU:CA         1:A:24:ILE:C         1:A:25:ILE:N         4         2.71           (1,80)         1:A:75:LEU:N         1:A:75:LEU:CA         1:A:75:LEU:C         1:A:76:ARG:N         10         2.68           (1,203)         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1:A:169:GLU:CA         1:A:169:GLU:C         17         2.67           (1,26)         1:A:21:ALA:N         1:A:21:ALA:CA         1:A:11:LEU:CA         1:A:169:GLU:C         17         2.65           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:24:ILE:C         18         2.63           (1,4)         1:A:8:GLU:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:24:ILE:C         18         2.63           (1,4)         1:A:8:3:LEU:N         1:A:8:GLU:CA         1:A:8:GLU:C         1:A:8:4:THR:N         2         2.61	(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	10	2.79
(1,16)         1:A:14:ARG:N         1:A:14:ARG:CA         1:A:14:ARG:C         1:A:15:THR:N         14         2.76           (1,75)         1:A:64:PHE:C         1:A:65:ALA:N         1:A:65:ALA:CA         1:A:65:ALA:C         16         2.74           (1,30)         1:A:24:ILE:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:24:ILE:C         1:A:25:ILE:N         4         2.71           (1,80)         1:A:75:LEU:N         1:A:75:LEU:CA         1:A:75:LEU:C         1:A:76:ARG:N         10         2.68           (1,203)         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1:A:169:GLU:CA         1:A:169:GLU:C         17         2.67           (1,26)         1:A:21:ALA:N         1:A:21:ALA:CA         1:A:21:ALA:C         1:A:22:ARG:N         4         2.65           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         12         2.64           (1,29)         1:A:23:SER:C         1:A:24:ILE:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:24:ILE:C         18         2.63           (1,4)         1:A:8:GLU:N         1:A:8:GLU:CA         1:A:8:GLU:C         1:A:9:ARG:N         5         2.62           (1,90)         1:A:8:GLU:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:33:LEU:C         1:A:49:ARG:N         5         2.61	(1,73)	1:A:63:ASN:C	1:A:64:PHE:N	1:A:64:PHE:CA	1:A:64:PHE:C	6	2.78
(1,75)         1:A:64:PHE:C         1:A:65:ALA:N         1:A:65:ALA:CA         1:A:65:ALA:C         16         2.74           (1,30)         1:A:24:ILE:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:24:ILE:C         1:A:25:ILE:N         4         2.71           (1,80)         1:A:75:LEU:N         1:A:75:LEU:CA         1:A:75:LEU:C         1:A:76:ARG:N         10         2.68           (1,203)         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1:A:169:GLU:CA         1:A:169:GLU:C         17         2.67           (1,26)         1:A:21:ALA:N         1:A:21:ALA:CA         1:A:21:ALA:C         1:A:21:ALA:C         1:A:22:ARG:N         4         2.65           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         12         2.64           (1,29)         1:A:23:SER:C         1:A:24:ILE:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:41:ILE:C         18         2.63           (1,4)         1:A:8:GLU:N         1:A:8:GLU:C         1:A:8:GLU:C         1:A:8:3:LEU:C         1:A:8:4:THR:N         2         2.61           (1,90)         1:A:8:4:THR:N         1:A:9:ARG:N         1:A:9:ARG:C         19         2.61           (1,92)         1:A:8:4:THR:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         <	(1,100)		1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C		12	
(1,30)         1:A:24:ILE:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:24:ILE:C         1:A:25:ILE:N         4         2.71           (1,80)         1:A:75:LEU:N         1:A:75:LEU:CA         1:A:75:LEU:C         1:A:76:ARG:N         10         2.68           (1,203)         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1:A:169:GLU:CA         1:A:169:GLU:C         17         2.67           (1,26)         1:A:21:ALA:N         1:A:21:ALA:CA         1:A:21:ALA:C         1:A:22:ARG:N         4         2.65           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:21:LEU:CA         1:A:21:LEU:C         12         2.64           (1,29)         1:A:23:SER:C         1:A:24:ILE:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:24:ILE:C         18         2.63           (1,4)         1:A:8:GLU:N         1:A:8:GLU:CA         1:A:8:GLU:C         1:A:9:ARG:N         5         2.62           (1,90)         1:A:83:LEU:N         1:A:83:LEU:CA         1:A:9:ARG:N         5         2.62           (1,90)         1:A:84:THR:N         1:A:84:THR:CA         1:A:9:ARG:CA         1:A:9:ARG:C         19         2.61           (1,29)         1:A:84:THR:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         15         2.55	(1,16)	1:A:14:ARG:N	1:A:14:ARG:CA	1:A:14:ARG:C	1:A:15:THR:N	14	2.76
(1,80)         1:A:75:LEU:N         1:A:75:LEU:CA         1:A:75:LEU:C         1:A:76:ARG:N         10         2.68           (1,203)         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1:A:169:GLU:CA         1:A:169:GLU:C         17         2.67           (1,26)         1:A:21:ALA:N         1:A:21:ALA:CA         1:A:21:ALA:C         1:A:22:ARG:N         4         2.65           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:41:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         12         2.64           (1,29)         1:A:23:SER:C         1:A:24:ILE:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:24:ILE:C         18         2.63           (1,4)         1:A:8:GLU:N         1:A:8:GLU:CA         1:A:8:GLU:C         1:A:9:ARG:N         5         2.62           (1,90)         1:A:8:GLU:C         1:A:9:ARG:CA         1:A:9:ARG:C         19         2.61           (1,5)         1:A:8:GLU:C         1:A:9:ARG:CA         1:A:9:ARG:C         19         2.61           (1,92)         1:A:84:THR:N         1:A:84:THR:CA         1:A:84:THR:C         1:A:85:ILE:N         7         2.56           (1,203)         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1:A:169:GLU:N         1:A:169:GLU:C         4         2.55           (1,122)         1:A:10	(1,75)	1:A:64:PHE:C	1:A:65:ALA:N	1:A:65:ALA:CA	1:A:65:ALA:C	16	2.74
(1,203)         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1:A:169:GLU:CA         1:A:169:GLU:C         17         2.67           (1,26)         1:A:21:ALA:N         1:A:21:ALA:CA         1:A:21:ALA:C         1:A:22:ARG:N         4         2.65           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         12         2.64           (1,29)         1:A:23:SER:C         1:A:24:ILE:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:24:ILE:C         18         2.63           (1,4)         1:A:8:GLU:N         1:A:8:GLU:CA         1:A:8:GLU:C         1:A:9:ARG:N         5         2.62           (1,90)         1:A:83:LEU:N         1:A:83:LEU:CA         1:A:84:THR:N         2         2.61           (1,5)         1:A:8:GLU:C         1:A:9:ARG:N         1:A:9:ARG:CA         1:A:9:ARG:C         19         2.61           (1,92)         1:A:8:4:THR:N         1:A:4:4:THR:CA         1:A:48:THR:C         1:A:85:ILE:N         7         2.56           (1,34)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         15         2.55           (1,203)         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1:A:169:GLU:CA         1:A:106:ASP:N         9         2.55           <	(1,30)			1:A:24:ILE:C	1:A:25:ILE:N	4	
(1,26)         1:A:21:ALA:N         1:A:21:ALA:CA         1:A:21:ALA:C         1:A:22:ARG:N         4         2.65           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         12         2.64           (1,29)         1:A:23:SER:C         1:A:24:ILE:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:24:ILE:C         18         2.63           (1,4)         1:A:8:GLU:N         1:A:8:GLU:CA         1:A:8:GLU:C         1:A:9:ARG:N         5         2.62           (1,90)         1:A:83:LEU:N         1:A:83:LEU:CA         1:A:83:LEU:C         1:A:84:THR:N         2         2.61           (1,5)         1:A:84:THR:N         1:A:9:ARG:C         19         2.61           (1,92)         1:A:84:THR:N         1:A:84:THR:CA         1:A:84:THR:C         1:A:85:ILE:N         7         2.56           (1,34)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         15         2.55           (1,203)         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1:A:169:GLU:CA         1:A:169:GLU:CA         1:A:106:ASP:N         9         2.55           (1,22)         1:A:17:THR:N         1:A:7:THR:CA         1:A:7:THR:C         1:A:8:GLU:N         18         2.52           (1,	(1,80)						
(1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         12         2.64           (1,29)         1:A:23:SER:C         1:A:24:ILE:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:24:ILE:C         18         2.63           (1,4)         1:A:8:GLU:N         1:A:8:GLU:CA         1:A:8:GLU:C         1:A:9:ARG:N         5         2.62           (1,90)         1:A:83:LEU:N         1:A:83:LEU:CA         1:A:83:LEU:C         1:A:84:THR:N         2         2.61           (1,5)         1:A:84:GLU:C         1:A:9:ARG:N         1:A:9:ARG:C         19         2.61           (1,5)         1:A:84:THR:N         1:A:9:ARG:N         1:A:9:ARG:C         19         2.61           (1,92)         1:A:84:THR:N         1:A:84:THR:CA         1:A:49:ARG:C         19         2.61           (1,92)         1:A:84:THR:N         1:A:84:THR:CA         1:A:48:THR:C         1:A:85:ILE:N         7         2.56           (1,34)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:N         7         2.56           (1,34)         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1:A:169:GLU:CA         1:A:169:GLU:CA         1:A:169:GLU:CA         1:A:169:GLU:CA         1:A:105:GLY:CA         1:A:1105:GLY:CA         <							
(1,29)         1:A:23:SER:C         1:A:24:ILE:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:24:ILE:C         18         2.63           (1,4)         1:A:8:GLU:N         1:A:8:GLU:CA         1:A:8:GLU:C         1:A:9:ARG:N         5         2.62           (1,90)         1:A:83:LEU:N         1:A:83:LEU:CA         1:A:83:LEU:C         1:A:84:THR:N         2         2.61           (1,5)         1:A:84:GLU:C         1:A:9:ARG:CA         1:A:9:ARG:C         19         2.61           (1,5)         1:A:84:THR:N         1:A:84:THR:CA         1:A:84:THR:C         1:A:85:ILE:N         7         2.56           (1,92)         1:A:84:THR:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         15         2.56           (1,34)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         15         2.55           (1,203)         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:CA         1:A:169:GLU:CA         1:A:106:ASP:N         9         2.55           (1,122)         1:A:105:GLY:N         1:A:105:GLY:CA         1:A:17:THR:C         1:A:8:GLU:N         18         2.52           (1,109)         1:A:98:GLU:C         1:A:99:LEU:CA         1:A:199:LEU:C         17         2.52           (1,190)         1	(1,26)		1:A:21:ALA:CA			4	2.65
(1,4)         1:A:8:GLU:N         1:A:8:GLU:CA         1:A:8:GLU:C         1:A:9:ARG:N         5         2.62           (1,90)         1:A:83:LEU:N         1:A:83:LEU:CA         1:A:83:LEU:C         1:A:84:THR:N         2         2.61           (1,5)         1:A:8:GLU:C         1:A:9:ARG:N         1:A:9:ARG:CA         1:A:9:ARG:C         19         2.61           (1,92)         1:A:84:THR:N         1:A:84:THR:CA         1:A:84:THR:C         1:A:85:ILE:N         7         2.56           (1,34)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         15         2.55           (1,203)         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1:A:169:GLU:CA         1:A:169:GLU:C         4         2.55           (1,122)         1:A:105:GLY:N         1:A:105:GLY:CA         1:A:105:GLY:C         1:A:106:ASP:N         9         2.55           (1,2)         1:A:7:THR:N         1:A:7:THR:CA         1:A:7:THR:C         1:A:8:GLU:N         18         2.52           (1,109)         1:A:98:GLU:C         1:A:99:LEU:CA         1:A:99:LEU:C         17         2.52           (1,132)         1:A:111:GLU:N         1:A:111:GLU:CA         1:A:111:GLU:C         1:A:163:MET:N         5         2.51 <t< td=""><td>(1,9)</td><td>1:A:10:ALA:C</td><td></td><td>1:A:11:LEU:CA</td><td>1:A:11:LEU:C</td><td>12</td><td></td></t<>	(1,9)	1:A:10:ALA:C		1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	12	
(1,90)         1:A:83:LEU:N         1:A:83:LEU:CA         1:A:83:LEU:C         1:A:84:THR:N         2         2.61           (1,5)         1:A:8:GLU:C         1:A:9:ARG:N         1:A:9:ARG:CA         1:A:9:ARG:C         19         2.61           (1,92)         1:A:84:THR:N         1:A:84:THR:CA         1:A:84:THR:C         1:A:85:ILE:N         7         2.56           (1,34)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         15         2.55           (1,203)         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1:A:169:GLU:CA         1:A:169:GLU:C         4         2.55           (1,122)         1:A:105:GLY:N         1:A:105:GLY:CA         1:A:105:GLY:C         1:A:106:ASP:N         9         2.55           (1,2)         1:A:7:THR:N         1:A:7:THR:CA         1:A:7:THR:C         1:A:8:GLU:N         18         2.52           (1,109)         1:A:98:GLU:C         1:A:99:LEU:CA         1:A:99:LEU:C         17         2.52           (1,132)         1:A:111:GLU:N         1:A:111:GLU:CA         1:A:111:GLU:C         1:A:112:LEU:N         5         2.51           (1,190)         1:A:162:GLU:N         1:A:22:ARG:CA         1:A:22:ARG:C         1:A:23:SER:N         20         2.49	(1,29)		1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C		2.63
(1,5)       1:A:8:GLU:C       1:A:9:ARG:N       1:A:9:ARG:CA       1:A:9:ARG:C       19       2.61         (1,92)       1:A:84:THR:N       1:A:84:THR:CA       1:A:84:THR:C       1:A:85:ILE:N       7       2.56         (1,34)       1:A:26:ILE:N       1:A:26:ILE:CA       1:A:26:ILE:C       1:A:27:ARG:N       15       2.55         (1,203)       1:A:168:GLN:C       1:A:169:GLU:N       1:A:169:GLU:CA       1:A:169:GLU:C       4       2.55         (1,122)       1:A:105:GLY:N       1:A:105:GLY:CA       1:A:105:GLY:C       1:A:106:ASP:N       9       2.55         (1,2)       1:A:7:THR:N       1:A:7:THR:CA       1:A:7:THR:C       1:A:8:GLU:N       18       2.52         (1,109)       1:A:98:GLU:C       1:A:99:LEU:N       1:A:99:LEU:C       17       2.52         (1,132)       1:A:111:GLU:N       1:A:111:GLU:CA       1:A:111:GLU:C       1:A:112:LEU:N       5       2.51         (1,190)       1:A:162:GLU:N       1:A:162:GLU:CA       1:A:162:GLU:C       1:A:163:MET:N       5       2.5         (1,28)       1:A:22:ARG:N       1:A:22:ARG:C       1:A:23:SER:N       20       2.49         (1,104)       1:A:50:GLU:N       1:A:52:ILE:N       1:A:52:ILE:CA       1:A:52:ILE:C       9	(1,4)	1:A:8:GLU:N					2.62
(1,92)         1:A:84:THR:N         1:A:84:THR:CA         1:A:84:THR:C         1:A:85:ILE:N         7         2.56           (1,34)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         15         2.55           (1,203)         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1:A:169:GLU:CA         1:A:169:GLU:C         4         2.55           (1,122)         1:A:105:GLY:N         1:A:105:GLY:CA         1:A:105:GLY:C         1:A:106:ASP:N         9         2.55           (1,2)         1:A:7:THR:N         1:A:7:THR:CA         1:A:7:THR:C         1:A:8:GLU:N         18         2.52           (1,109)         1:A:98:GLU:C         1:A:99:LEU:N         1:A:99:LEU:CA         1:A:99:LEU:C         17         2.52           (1,132)         1:A:111:GLU:N         1:A:111:GLU:CA         1:A:111:GLU:C         1:A:112:LEU:N         5         2.51           (1,190)         1:A:162:GLU:N         1:A:162:GLU:CA         1:A:162:GLU:C         1:A:163:MET:N         5         2.5           (1,28)         1:A:22:ARG:N         1:A:22:ARG:CA         1:A:22:ARG:C         1:A:23:SER:N         20         2.49           (1,104)         1:A:51:PHE:C         1:A:52:ILE:N         1:A:52:ILE:CA         1:A:52:ILE:C         9	(1,90)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:THR:N		2.61
(1,34)         1:A:26:ILE:N         1:A:26:ILE:CA         1:A:26:ILE:C         1:A:27:ARG:N         15         2.55           (1,203)         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1:A:169:GLU:CA         1:A:169:GLU:C         4         2.55           (1,122)         1:A:105:GLY:N         1:A:105:GLY:CA         1:A:105:GLY:C         1:A:106:ASP:N         9         2.55           (1,2)         1:A:7:THR:N         1:A:7:THR:CA         1:A:7:THR:C         1:A:8:GLU:N         18         2.52           (1,109)         1:A:98:GLU:C         1:A:99:LEU:N         1:A:99:LEU:CA         1:A:99:LEU:C         17         2.52           (1,132)         1:A:111:GLU:N         1:A:111:GLU:CA         1:A:111:GLU:C         1:A:111:GLU:N         5         2.51           (1,190)         1:A:162:GLU:N         1:A:162:GLU:CA         1:A:162:GLU:C         1:A:163:MET:N         5         2.5           (1,28)         1:A:22:ARG:N         1:A:22:ARG:CA         1:A:22:ARG:C         1:A:23:SER:N         20         2.49           (1,104)         1:A:96:GLU:N         1:A:96:GLU:CA         1:A:96:GLU:C         1:A:97:VAL:N         20         2.48           (1,65)         1:A:51:PHE:C         1:A:52:ILE:N         1:A:52:ILE:CA         1:A:52:ILE:C         9	(1,5)	1:A:8:GLU:C	1:A:9:ARG:N	1:A:9:ARG:CA	1:A:9:ARG:C	19	2.61
(1,203)         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1:A:169:GLU:CA         1:A:169:GLU:C         4         2.55           (1,122)         1:A:105:GLY:N         1:A:105:GLY:CA         1:A:105:GLY:C         1:A:106:ASP:N         9         2.55           (1,2)         1:A:7:THR:N         1:A:7:THR:CA         1:A:7:THR:C         1:A:8:GLU:N         18         2.52           (1,109)         1:A:98:GLU:C         1:A:99:LEU:N         1:A:99:LEU:CA         1:A:99:LEU:C         17         2.52           (1,132)         1:A:111:GLU:N         1:A:111:GLU:CA         1:A:111:GLU:C         1:A:112:LEU:N         5         2.51           (1,190)         1:A:162:GLU:N         1:A:162:GLU:CA         1:A:162:GLU:C         1:A:163:MET:N         5         2.5           (1,28)         1:A:22:ARG:N         1:A:22:ARG:C         1:A:23:SER:N         20         2.49           (1,104)         1:A:96:GLU:N         1:A:96:GLU:CA         1:A:97:VAL:N         20         2.49           (1,65)         1:A:51:PHE:C         1:A:52:ILE:N         1:A:52:ILE:CA         1:A:52:ILE:C         9         2.48	(1,92)	1:A:84:THR:N	1:A:84:THR:CA	1:A:84:THR:C	1:A:85:ILE:N	7	2.56
(1,122)         1:A:105:GLY:N         1:A:105:GLY:CA         1:A:105:GLY:C         1:A:106:ASP:N         9         2.55           (1,2)         1:A:7:THR:N         1:A:7:THR:CA         1:A:7:THR:C         1:A:8:GLU:N         18         2.52           (1,109)         1:A:98:GLU:C         1:A:99:LEU:N         1:A:99:LEU:CA         1:A:99:LEU:C         17         2.52           (1,132)         1:A:111:GLU:N         1:A:111:GLU:CA         1:A:111:GLU:C         1:A:112:LEU:N         5         2.51           (1,190)         1:A:162:GLU:N         1:A:162:GLU:CA         1:A:162:GLU:C         1:A:163:MET:N         5         2.5           (1,28)         1:A:22:ARG:N         1:A:22:ARG:C         1:A:23:SER:N         20         2.49           (1,104)         1:A:96:GLU:N         1:A:96:GLU:CA         1:A:97:VAL:N         20         2.49           (1,65)         1:A:51:PHE:C         1:A:52:ILE:N         1:A:52:ILE:CA         1:A:52:ILE:C         9         2.48	(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	15	2.55
(1,2)       1:A:7:THR:N       1:A:7:THR:CA       1:A:7:THR:C       1:A:8:GLU:N       18       2.52         (1,109)       1:A:98:GLU:C       1:A:99:LEU:N       1:A:99:LEU:CA       1:A:99:LEU:C       17       2.52         (1,132)       1:A:111:GLU:N       1:A:111:GLU:CA       1:A:111:GLU:C       1:A:112:LEU:N       5       2.51         (1,190)       1:A:162:GLU:N       1:A:162:GLU:CA       1:A:162:GLU:C       1:A:163:MET:N       5       2.5         (1,28)       1:A:22:ARG:N       1:A:22:ARG:CA       1:A:22:ARG:C       1:A:23:SER:N       20       2.49         (1,104)       1:A:96:GLU:N       1:A:96:GLU:CA       1:A:96:GLU:C       1:A:97:VAL:N       20       2.49         (1,65)       1:A:51:PHE:C       1:A:52:ILE:N       1:A:52:ILE:CA       1:A:52:ILE:C       9       2.48	(1,203)						
(1,109)       1:A:98:GLU:C       1:A:99:LEU:N       1:A:99:LEU:CA       1:A:99:LEU:C       17       2.52         (1,132)       1:A:111:GLU:N       1:A:111:GLU:CA       1:A:111:GLU:C       1:A:112:LEU:N       5       2.51         (1,190)       1:A:162:GLU:N       1:A:162:GLU:CA       1:A:162:GLU:C       1:A:163:MET:N       5       2.5         (1,28)       1:A:22:ARG:N       1:A:22:ARG:CA       1:A:22:ARG:C       1:A:23:SER:N       20       2.49         (1,104)       1:A:96:GLU:N       1:A:96:GLU:CA       1:A:96:GLU:C       1:A:97:VAL:N       20       2.49         (1,65)       1:A:51:PHE:C       1:A:52:ILE:N       1:A:52:ILE:CA       1:A:52:ILE:C       9       2.48	( / /						
(1,132)         1:A:111:GLU:N         1:A:111:GLU:CA         1:A:111:GLU:C         1:A:112:LEU:N         5         2.51           (1,190)         1:A:162:GLU:N         1:A:162:GLU:CA         1:A:162:GLU:C         1:A:163:MET:N         5         2.5           (1,28)         1:A:22:ARG:N         1:A:22:ARG:CA         1:A:22:ARG:C         1:A:23:SER:N         20         2.49           (1,104)         1:A:96:GLU:N         1:A:96:GLU:C         1:A:97:VAL:N         20         2.49           (1,65)         1:A:51:PHE:C         1:A:52:ILE:N         1:A:52:ILE:CA         1:A:52:ILE:C         9         2.48	_ , ,						
(1,190)     1:A:162:GLU:N     1:A:162:GLU:CA     1:A:162:GLU:C     1:A:163:MET:N     5     2.5       (1,28)     1:A:22:ARG:N     1:A:22:ARG:CA     1:A:22:ARG:C     1:A:23:SER:N     20     2.49       (1,104)     1:A:96:GLU:N     1:A:96:GLU:CA     1:A:96:GLU:C     1:A:97:VAL:N     20     2.49       (1,65)     1:A:51:PHE:C     1:A:52:ILE:N     1:A:52:ILE:CA     1:A:52:ILE:C     9     2.48	· · /						
(1,28)     1:A:22:ARG:N     1:A:22:ARG:CA     1:A:22:ARG:C     1:A:23:SER:N     20     2.49       (1,104)     1:A:96:GLU:N     1:A:96:GLU:CA     1:A:96:GLU:C     1:A:97:VAL:N     20     2.49       (1,65)     1:A:51:PHE:C     1:A:52:ILE:N     1:A:52:ILE:CA     1:A:52:ILE:C     9     2.48							
(1,104)     1:A:96:GLU:N     1:A:96:GLU:CA     1:A:96:GLU:C     1:A:97:VAL:N     20     2.49       (1,65)     1:A:51:PHE:C     1:A:52:ILE:N     1:A:52:ILE:CA     1:A:52:ILE:C     9     2.48	,						
(1,65) 1:A:51:PHE:C 1:A:52:ILE:N 1:A:52:ILE:CA 1:A:52:ILE:C 9 2.48	· · /						
	· · /						
	(1,65)	1:A:51:PHE:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C		



(1,208)	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	$\mathbf{Model}$	Violation ( o )
	1:A:171:GLY:N	1:A:171:GLY:CA	1:A:171:GLY:C	1:A:172:GLU:N	1	2.47
(1,13)	1:A:12:GLY:C	1:A:13:ARG:N	1:A:13:ARG:CA	1:A:13:ARG:C	6	2.47
/	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	1:A:108:THR:N	15	2.47
· /	1:A:87:TRP:N	1:A:87:TRP:CA	1:A:87:TRP:C	1:A:88:VAL:N	12	2.45
. ,	1:A:82:ARG:N	1:A:82:ARG:CA	1:A:82:ARG:C	1:A:83:LEU:N	19	2.45
· · /	1:A:114:HIS:N	1:A:114:HIS:CA	1:A:114:HIS:C	1:A:115:ALA:N	14	2.45
(1,10)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	16	2.44
(1,100)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:TYR:N	1	2.43
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	10	2.42
(1,58)	1:A:45:ASN:N	1:A:45:ASN:CA	1:A:45:ASN:C	1:A:46:ARG:N	12	2.41
	1:A:13:ARG:N	1:A:13:ARG:CA	1:A:13:ARG:C	1:A:14:ARG:N	15	2.41
(1,77)	1:A:73:ASP:C	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	19	2.39
(1,138)	1:A:114:HIS:N	1:A:114:HIS:CA	1:A:114:HIS:C	1:A:115:ALA:N	20	2.38
(1,98)	1:A:87:TRP:N	1:A:87:TRP:CA	1:A:87:TRP:C	1:A:88:VAL:N	15	2.37
/	1:A:128:GLY:N	1:A:128:GLY:CA	1:A:128:GLY:C	1:A:129:TRP:N	16	2.35
(1,80)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:ARG:N	14	2.33
/	1:A:82:ARG:N	1:A:82:ARG:CA	1:A:82:ARG:C	1:A:83:LEU:N	14	2.32
( / /	1:A:175:ALA:N	1:A:175:ALA:CA	1:A:175:ALA:C	1:A:176:ALA:N	1	2.31
(1,1)	1:A:6:ALA:C	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	11	2.31
(1,65)	1:A:51:PHE:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	3	2.3
/	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1:A:21:ALA:N	1	2.3
(1,90)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:THR:N	7	2.27
/	1:A:82:ARG:N	1:A:82:ARG:CA	1:A:82:ARG:C	1:A:83:LEU:N	10	2.27
(1,65)	1:A:51:PHE:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	5	2.27
(1,48)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:VAL:N	20	2.27
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	9	2.27
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	19	2.26
	1:A:108:THR:N	1:A:108:THR:CA	1:A:108:THR:C	1:A:109:LEU:N	5	2.25
(1,92)	1:A:84:THR:N	1:A:84:THR:CA	1:A:84:THR:C	1:A:85:ILE:N	12	2.24
(1,33)	1:A:25:ILE:C	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	20	2.24
(1,107)	1:A:97:VAL:C	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	20	2.24
(1,100)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:TYR:N	3	2.24
· · /	1:A:22:ARG:N	1:A:22:ARG:CA	1:A:22:ARG:C	1:A:23:SER:N	6	2.22
/	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	6	2.21
	1:A:82:ARG:N	1:A:82:ARG:CA	1:A:82:ARG:C	1:A:83:LEU:N	20	2.18
	1:A:105:GLY:N	1:A:105:GLY:CA	1:A:105:GLY:C	1:A:106:ASP:N	20	2.18
· · /	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:VAL:N	16	2.17
(1,10)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	20	2.16
(1,77)	1:A:73:ASP:C	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	4	2.14
(1,75)	1:A:64:PHE:C	1:A:65:ALA:N	1:A:65:ALA:CA	1:A:65:ALA:C	11	2.14
	1:A:134:ASP:N	1:A:134:ASP:CA	1:A:134:ASP:C	1:A:135:PHE:N	4	2.14
(1,8)	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	8	2.11
(1,106)	1:A:97:VAL:N	1:A:97:VAL:CA	1:A:97:VAL:C	1:A:98:GLU:N	1	2.1
(1,100)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:TYR:N	19	2.06
· · /	1:A:128:GLY:N	1:A:128:GLY:CA	1:A:128:GLY:C	1:A:129:TRP:N	15	2.05
( , ,	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	2	2.04
(1,26)	1:A:21:ALA:N	1:A:21:ALA:CA	1:A:21:ALA:C	1:A:22:ARG:N	15	2.02
/	1:A:133:LEU:N	1:A:133:LEU:CA	1:A:133:LEU:C	1:A:134:ASP:N	3	2.02
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	8	1.99
(1,108)	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	1:A:99:LEU:N	18	1.96
1	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1:A:75:LEU:N	7	1.94



Key         Atom-1         Atom-2         Atom-3         Atom-4         Model           (1,138)         1:A:114:HIS:N         1:A:114:HIS:CA         1:A:114:HIS:C         1:A:115:ALA:N         3           (1,136)         1:A:113:GLU:N         1:A:113:GLU:CA         1:A:114:HIS:N         4           (1,29)         1:A:23:SER:C         1:A:24:ILE:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:24:ILE:C         2           (1,113)         1:A:100:ARG:C         1:A:101:LEU:N         1:A:101:LEU:CA         1:A:101:LEU:C         14           (1,38)         1:A:28:GLN:N         1:A:28:GLN:CA         1:A:29:ARG:C         1:A:30:TYR:N         8           (1,40)         1:A:29:ARG:N         1:A:29:ARG:CA         1:A:30:TYR:N         8           (1,48)         1:A:36:GLU:N         1:A:36:GLU:CA         1:A:36:GLU:C         1:A:37:VAL:N         7           (1,95)         1:A:85:ILE:C         1:A:86:SER:N         1:A:86:SER:CA         1:A:86:SER:C         5           (1,164)         1:A:109:LEU:N         1:A:109:LEU:C         1:A:109:LEU:N         1:A:109:LEU:C         1:A:109:LEU:N         10           (1,107)         1:A:99:GLU:N         1:A:98:GLU:N         1:A:98:GLU:CA         1:A:10:LEU:C         19           (1,84)         1:A:10:LEU:C	Violation (∘)  1.93  1.93  1.92  1.92  1.99  1.89  1.88  1.87  1.85  1.83  1.82  1.8  1.77  1.76  1.75  1.75  1.74  1.69  1.69
(1,136)         1:A:113:GLU:N         1:A:113:GLU:CA         1:A:113:GLU:C         1:A:114:HIS:N         4           (1,29)         1:A:23:SER:C         1:A:24:ILE:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:24:ILE:C         2           (1,113)         1:A:100:ARG:C         1:A:101:LEU:N         1:A:101:LEU:CA         1:A:101:LEU:C         14           (1,38)         1:A:28:GLN:N         1:A:28:GLN:CA         1:A:29:ARG:N         17           (1,40)         1:A:29:ARG:N         1:A:29:ARG:CA         1:A:29:ARG:C         1:A:30:TYR:N         8           (1,48)         1:A:36:GLU:N         1:A:36:GLU:CA         1:A:36:GLU:C         1:A:37:VAL:N         7           (1,95)         1:A:85:ILE:C         1:A:86:SER:N         1:A:86:SER:CA         1:A:486:SER:C         5           (1,164)         1:A:128:GLY:N         1:A:109:LEU:CA         1:A:128:GLY:C         1:A:110:LEU:N         10           (1,170)         1:A:197:VAL:C         1:A:109:LEU:CA         1:A:109:LEU:C         1:A:110:LEU:N         10           (1,170)         1:A:197:VAL:C         1:A:110:LEU:N         1:A:110:LEU:CA         1:A:110:LEU:CA         1:A:110:LEU:C         19           (1,84)         1:A:109:LEU:C         1:A:110:LEU:N         1:A:110:LEU:CA         1:A:110:LEU:C         19	1.93 1.92 1.92 1.99 1.89 1.88 1.87 1.85 1.83 1.83 1.82 1.8 1.77 1.76 1.75 1.75 1.74 1.74 1.69
(1,29)         1:A:23:SER:C         1:A:24:ILE:N         1:A:24:ILE:CA         1:A:24:ILE:C         2           (1,113)         1:A:100:ARG:C         1:A:101:LEU:N         1:A:101:LEU:CA         1:A:101:LEU:C         14           (1,38)         1:A:28:GLN:N         1:A:28:GLN:CA         1:A:29:ARG:C         1:A:29:ARG:N         17           (1,40)         1:A:29:ARG:N         1:A:29:ARG:CA         1:A:29:ARG:C         1:A:30:TYR:N         8           (1,48)         1:A:36:GLU:N         1:A:36:GLU:CA         1:A:36:GLU:C         1:A:37:VAL:N         7           (1,95)         1:A:85:ILE:C         1:A:86:SER:N         1:A:86:SER:CA         1:A:86:SER:C         5           (1,164)         1:A:128:GLY:N         1:A:128:GLY:CA         1:A:128:GLY:C         1:A:109:LEU:C         1:A:109:LEU:N         10           (1,128)         1:A:109:LEU:N         1:A:109:LEU:CA         1:A:109:LEU:C         1:A:110:LEU:N         10           (1,107)         1:A:97:VAL:C         1:A:98:GLU:N         1:A:109:LEU:C         1:A:110:LEU:N         1           (1,129)         1:A:109:LEU:C         1:A:110:LEU:N         1:A:110:LEU:CA         1:A:177:CYS:C         1:A:77:CYS:C         1:A:77:CYS:C         1:A:77:CYS:C         1:A:168:GLN:N         1           (1,202)	1.92 1.92 1.9 1.89 1.88 1.87 1.85 1.83 1.83 1.82 1.8 1.77 1.76 1.75 1.75 1.74 1.74 1.69
(1,113)         1:A:100:ARG:C         1:A:101:LEU:N         1:A:101:LEU:CA         1:A:101:LEU:C         14           (1,38)         1:A:28:GLN:N         1:A:28:GLN:CA         1:A:29:ARG:N         1:A:29:ARG:N         17           (1,40)         1:A:29:ARG:N         1:A:29:ARG:CA         1:A:29:ARG:C         1:A:30:TYR:N         8           (1,48)         1:A:36:GLU:N         1:A:36:GLU:CA         1:A:36:GLU:C         1:A:37:VAL:N         7           (1,95)         1:A:85:ILE:C         1:A:86:SER:N         1:A:86:SER:CA         1:A:86:SER:C         5           (1,164)         1:A:128:GLY:N         1:A:128:GLY:CA         1:A:128:GLY:C         1:A:129:TRP:N         14           (1,128)         1:A:109:LEU:N         1:A:109:LEU:CA         1:A:109:LEU:C         1:A:110:LEU:N         10           (1,107)         1:A:97:VAL:C         1:A:98:GLU:N         1:A:98:GLU:CA         1:A:498:GLU:C         5           (1,109)         1:A:109:LEU:C         1:A:110:LEU:N         1:A:110:LEU:CA         1:A:110:LEU:C         19           (1,84)         1:A:77:CYS:N         1:A:77:CYS:CA         1:A:77:CYS:C         1:A:78:GLU:N         2           (1,202)         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1	1.92 1.9 1.89 1.88 1.87 1.85 1.83 1.83 1.82 1.8 1.77 1.76 1.75 1.75 1.74 1.74 1.69
(1,38)         1:A:28:GLN:N         1:A:28:GLN:CA         1:A:28:GLN:C         1:A:29:ARG:N         17           (1,40)         1:A:29:ARG:N         1:A:29:ARG:CA         1:A:29:ARG:C         1:A:30:TYR:N         8           (1,48)         1:A:36:GLU:N         1:A:36:GLU:CA         1:A:36:GLU:C         1:A:37:VAL:N         7           (1,95)         1:A:85:ILE:C         1:A:86:SER:N         1:A:86:SER:CA         1:A:86:SER:C         5           (1,164)         1:A:128:GLY:N         1:A:128:GLY:CA         1:A:128:GLY:C         1:A:129:TRP:N         14           (1,128)         1:A:109:LEU:N         1:A:109:LEU:C         1:A:109:LEU:C         1:A:100:LEU:N         10           (1,107)         1:A:197:VAL:C         1:A:498:GLU:N         1:A:498:GLU:CA         1:A:498:GLU:C         5           (1,107)         1:A:109:LEU:C         1:A:110:LEU:N         1:A:110:LEU:CA         1:A:110:LEU:C         19           (1,202)         1:A:109:LEU:C         1:A:110:LEU:C         1:A:168:GLN:C         1:A:168:GLN:C         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1           (1,17)         1:A:14:ARG:C         1:A:15:THR:N         1:A:15:THR:CA         1:A:15:THR:C         6           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:C         1:A:25:ILE:C	1.9 1.89 1.88 1.87 1.85 1.83 1.83 1.82 1.8 1.77 1.76 1.75 1.75 1.74 1.69
(1,40)         1:A:29:ARG:N         1:A:29:ARG:CA         1:A:29:ARG:C         1:A:30:TYR:N         8           (1,48)         1:A:36:GLU:N         1:A:36:GLU:CA         1:A:36:GLU:C         1:A:37:VAL:N         7           (1,95)         1:A:85:ILE:C         1:A:86:SER:N         1:A:86:SER:CA         1:A:86:SER:C         5           (1,164)         1:A:128:GLY:N         1:A:128:GLY:CA         1:A:128:GLY:C         1:A:129:TRP:N         14           (1,128)         1:A:109:LEU:N         1:A:109:LEU:C         1:A:109:LEU:C         1:A:110:LEU:N         10           (1,107)         1:A:97:VAL:C         1:A:98:GLU:N         1:A:98:GLU:CA         1:A:98:GLU:C         5           (1,107)         1:A:109:LEU:C         1:A:110:LEU:N         1:A:110:LEU:CA         1:A:110:LEU:C         19           (1,34)         1:A:77:CYS:N         1:A:77:CYS:CA         1:A:77:CYS:C         1:A:78:GLU:N         2           (1,202)         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1           (1,17)         1:A:14:ARG:C         1:A:15:THR:N         1:A:15:THR:CA         1:A:15:THR:C         6           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         14	1.89 1.88 1.87 1.85 1.83 1.83 1.82 1.8 1.77 1.76 1.75 1.75 1.74 1.69
(1,48)         1:A:36:GLU:N         1:A:36:GLU:CA         1:A:36:GLU:C         1:A:37:VAL:N         7           (1,95)         1:A:85:ILE:C         1:A:86:SER:N         1:A:86:SER:CA         1:A:86:SER:C         5           (1,164)         1:A:128:GLY:N         1:A:128:GLY:CA         1:A:128:GLY:C         1:A:129:TRP:N         14           (1,128)         1:A:109:LEU:N         1:A:109:LEU:CA         1:A:109:LEU:C         1:A:110:LEU:N         10           (1,107)         1:A:97:VAL:C         1:A:98:GLU:N         1:A:98:GLU:CA         1:A:498:GLU:C         5           (1,109)         1:A:109:LEU:C         1:A:110:LEU:N         1:A:110:LEU:CA         1:A:110:LEU:C         19           (1,84)         1:A:77:CYS:N         1:A:77:CYS:CA         1:A:77:CYS:C         1:A:78:GLU:N         2           (1,202)         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1           (1,17)         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:168:GLN:C         1:A:15:THR:CA         1:A:15:THR:C         6           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         14           (1,32)         1:A:25:ILE:N         1:A:25:ILE:CA         1:A:88:VAL:C         1:A:89:TYR:N	1.88 1.87 1.85 1.83 1.83 1.82 1.8 1.8 1.77 1.76 1.75 1.75 1.74 1.74 1.69
(1,95)         1:A:85:ILE:C         1:A:86:SER:N         1:A:86:SER:CA         1:A:86:SER:C         5           (1,164)         1:A:128:GLY:N         1:A:128:GLY:CA         1:A:128:GLY:C         1:A:129:TRP:N         14           (1,128)         1:A:109:LEU:N         1:A:109:LEU:CA         1:A:109:LEU:C         1:A:110:LEU:N         10           (1,107)         1:A:97:VAL:C         1:A:98:GLU:N         1:A:98:GLU:CA         1:A:198:GLU:C         5           (1,129)         1:A:109:LEU:C         1:A:110:LEU:N         1:A:110:LEU:CA         1:A:110:LEU:C         19           (1,84)         1:A:77:CYS:N         1:A:77:CYS:CA         1:A:77:CYS:C         1:A:78:GLU:N         2           (1,202)         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1           (1,17)         1:A:14:ARG:C         1:A:15:THR:N         1:A:15:THR:CA         1:A:169:GLU:N         1           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         14           (1,32)         1:A:25:ILE:N         1:A:25:ILE:CA         1:A:25:ILE:C         1:A:26:ILE:N         6           (1,100)         1:A:88:VAL:N         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:C         1:A:47:ILE:N         4	1.87 1.85 1.83 1.83 1.82 1.8 1.8 1.77 1.76 1.75 1.75 1.74 1.74 1.69
(1,164)         1:A:128:GLY:N         1:A:128:GLY:CA         1:A:128:GLY:C         1:A:129:TRP:N         14           (1,128)         1:A:109:LEU:N         1:A:109:LEU:CA         1:A:109:LEU:C         1:A:110:LEU:N         10           (1,107)         1:A:97:VAL:C         1:A:98:GLU:N         1:A:98:GLU:CA         1:A:98:GLU:C         5           (1,129)         1:A:109:LEU:C         1:A:110:LEU:N         1:A:110:LEU:CA         1:A:110:LEU:C         19           (1,84)         1:A:77:CYS:N         1:A:77:CYS:CA         1:A:77:CYS:C         1:A:78:GLU:N         2           (1,84)         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:168:GLN:C         1:A:78:GLU:N         2           (1,202)         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1           (1,17)         1:A:14:ARG:C         1:A:15:THR:N         1:A:15:THR:CA         1:A:15:THR:C         6           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         14           (1,32)         1:A:25:ILE:N         1:A:25:ILE:CA         1:A:25:ILE:C         1:A:26:ILE:N         6           (1,100)         1:A:88:VAL:N         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:C         1:A:47:ILE:N         4           (1,38)	1.85 1.83 1.82 1.8 1.8 1.77 1.76 1.75 1.75 1.74 1.74 1.69
(1,128)         1:A:109:LEU:N         1:A:109:LEU:CA         1:A:109:LEU:C         1:A:110:LEU:N         10           (1,107)         1:A:97:VAL:C         1:A:98:GLU:N         1:A:98:GLU:CA         1:A:98:GLU:C         5           (1,129)         1:A:109:LEU:C         1:A:110:LEU:N         1:A:110:LEU:CA         1:A:110:LEU:C         19           (1,84)         1:A:109:LEU:C         1:A:110:LEU:CA         1:A:110:LEU:C         19           (1,84)         1:A:168:GLN:N         1:A:77:CYS:CA         1:A:77:CYS:C         1:A:78:GLU:N         2           (1,202)         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1           (1,17)         1:A:168:GLN:N         1:A:15:THR:N         1:A:15:THR:CA         1:A:15:THR:C         6           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         14           (1,32)         1:A:25:ILE:N         1:A:25:ILE:CA         1:A:25:ILE:C         1:A:26:ILE:N         6           (1,100)         1:A:88:VAL:N         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:C         1:A:47:ILE:N         4           (1,60)         1:A:46:ARG:N         1:A:114:HIS:CA         1:A:114:HIS:C         1:A:115:ALA:N         19           (1,96)	1.83 1.82 1.8 1.8 1.8 1.77 1.76 1.75 1.75 1.74 1.74 1.69
(1,107)         1:A:97:VAL:C         1:A:98:GLU:N         1:A:98:GLU:CA         1:A:98:GLU:C         5           (1,129)         1:A:109:LEU:C         1:A:110:LEU:N         1:A:110:LEU:CA         1:A:110:LEU:C         19           (1,84)         1:A:77:CYS:N         1:A:77:CYS:CA         1:A:77:CYS:C         1:A:78:GLU:N         2           (1,202)         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1           (1,17)         1:A:14:ARG:C         1:A:15:THR:N         1:A:15:THR:CA         1:A:15:THR:C         6           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         14           (1,32)         1:A:25:ILE:N         1:A:25:ILE:CA         1:A:25:ILE:C         1:A:26:ILE:N         6           (1,100)         1:A:88:VAL:N         1:A:88:VAL:CA         1:A:88:VAL:C         1:A:89:TYR:N         6           (1,60)         1:A:46:ARG:N         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:C         1:A:47:ILE:N         4           (1,38)         1:A:114:HIS:N         1:A:114:HIS:CA         1:A:114:HIS:C         1:A:115:ALA:N         19           (1,96)         1:A:86:SER:N         1:A:86:SER:CA         1:A:86:SER:C         1:A:111:GLU:N         14	1.83 1.82 1.8 1.8 1.77 1.76 1.75 1.75 1.74 1.74 1.69
(1,129)         1:A:109:LEU:C         1:A:110:LEU:N         1:A:110:LEU:CA         1:A:110:LEU:C         19           (1,84)         1:A:77:CYS:N         1:A:77:CYS:CA         1:A:77:CYS:C         1:A:78:GLU:N         2           (1,202)         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1           (1,17)         1:A:14:ARG:C         1:A:15:THR:N         1:A:15:THR:CA         1:A:15:THR:C         6           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         14           (1,32)         1:A:25:ILE:N         1:A:25:ILE:CA         1:A:25:ILE:C         1:A:26:ILE:N         6           (1,100)         1:A:88:VAL:N         1:A:88:VAL:CA         1:A:88:VAL:C         1:A:89:TYR:N         6           (1,60)         1:A:46:ARG:N         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:C         1:A:47:ILE:N         4           (1,138)         1:A:114:HIS:N         1:A:114:HIS:CA         1:A:114:HIS:C         1:A:115:ALA:N         19           (1,96)         1:A:86:SER:N         1:A:86:SER:CA         1:A:86:SER:C         1:A:111:GLU:N         14           (1,130)         1:A:110:LEU:N         1:A:110:LEU:CA         1:A:110:LEU:C         1:A:1111:GLU:N         12	1.82 1.8 1.8 1.77 1.76 1.75 1.75 1.74 1.74 1.69
(1,84)         1:A:77:CYS:N         1:A:77:CYS:CA         1:A:77:CYS:C         1:A:78:GLU:N         2           (1,202)         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1           (1,17)         1:A:14:ARG:C         1:A:15:THR:N         1:A:15:THR:CA         1:A:15:THR:C         6           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         14           (1,32)         1:A:25:ILE:N         1:A:25:ILE:CA         1:A:25:ILE:C         1:A:26:ILE:N         6           (1,100)         1:A:88:VAL:N         1:A:88:VAL:CA         1:A:88:VAL:C         1:A:89:TYR:N         6           (1,60)         1:A:46:ARG:N         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:C         1:A:47:ILE:N         4           (1,138)         1:A:114:HIS:N         1:A:114:HIS:CA         1:A:114:HIS:C         1:A:115:ALA:N         19           (1,96)         1:A:86:SER:N         1:A:86:SER:CA         1:A:86:SER:C         1:A:111:GLU:N         14           (1,130)         1:A:110:LEU:N         1:A:110:LEU:CA         1:A:110:LEU:C         1:A:111:GLU:N         12	1.8 1.8 1.77 1.76 1.75 1.75 1.74 1.74 1.69
(1,202)         1:A:168:GLN:N         1:A:168:GLN:CA         1:A:168:GLN:C         1:A:169:GLU:N         1           (1,17)         1:A:14:ARG:C         1:A:15:THR:N         1:A:15:THR:CA         1:A:15:THR:C         6           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         14           (1,32)         1:A:25:ILE:N         1:A:25:ILE:CA         1:A:25:ILE:C         1:A:26:ILE:N         6           (1,100)         1:A:88:VAL:N         1:A:88:VAL:CA         1:A:88:VAL:C         1:A:89:TYR:N         6           (1,60)         1:A:46:ARG:N         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:C         1:A:47:ILE:N         4           (1,138)         1:A:114:HIS:N         1:A:114:HIS:CA         1:A:114:HIS:C         1:A:115:ALA:N         19           (1,96)         1:A:86:SER:N         1:A:86:SER:CA         1:A:86:SER:C         1:A:87:TRP:N         16           (1,130)         1:A:110:LEU:N         1:A:110:LEU:CA         1:A:110:LEU:C         1:A:111:GLU:N         12	1.8 1.77 1.76 1.75 1.75 1.74 1.74 1.69
(1,17)         1:A:14:ARG:C         1:A:15:THR:N         1:A:15:THR:CA         1:A:15:THR:C         6           (1,9)         1:A:10:ALA:C         1:A:11:LEU:N         1:A:11:LEU:CA         1:A:11:LEU:C         14           (1,32)         1:A:25:ILE:N         1:A:25:ILE:CA         1:A:25:ILE:C         1:A:26:ILE:N         6           (1,100)         1:A:88:VAL:N         1:A:88:VAL:CA         1:A:88:VAL:C         1:A:89:TYR:N         6           (1,60)         1:A:46:ARG:N         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:C         1:A:47:ILE:N         4           (1,138)         1:A:114:HIS:N         1:A:114:HIS:CA         1:A:114:HIS:C         1:A:115:ALA:N         19           (1,96)         1:A:86:SER:N         1:A:86:SER:CA         1:A:86:SER:C         1:A:87:TRP:N         16           (1,130)         1:A:110:LEU:N         1:A:110:LEU:CA         1:A:110:LEU:C         1:A:111:GLU:N         14           (1,130)         1:A:110:LEU:N         1:A:110:LEU:CA         1:A:110:LEU:C         1:A:111:GLU:N         12	1.77 1.76 1.75 1.75 1.74 1.74 1.69
(1,9)       1:A:10:ALA:C       1:A:11:LEU:N       1:A:11:LEU:CA       1:A:11:LEU:C       14         (1,32)       1:A:25:ILE:N       1:A:25:ILE:CA       1:A:25:ILE:C       1:A:26:ILE:N       6         (1,100)       1:A:88:VAL:N       1:A:88:VAL:CA       1:A:88:VAL:C       1:A:89:TYR:N       6         (1,60)       1:A:46:ARG:N       1:A:46:ARG:CA       1:A:46:ARG:C       1:A:47:ILE:N       4         (1,138)       1:A:114:HIS:N       1:A:114:HIS:CA       1:A:114:HIS:C       1:A:115:ALA:N       19         (1,96)       1:A:86:SER:N       1:A:86:SER:CA       1:A:86:SER:C       1:A:87:TRP:N       16         (1,130)       1:A:110:LEU:N       1:A:110:LEU:CA       1:A:110:LEU:C       1:A:111:GLU:N       14         (1,130)       1:A:110:LEU:N       1:A:110:LEU:CA       1:A:110:LEU:C       1:A:111:GLU:N       12	1.76 1.75 1.75 1.74 1.74 1.69
(1,32)         1:A:25:ILE:N         1:A:25:ILE:CA         1:A:25:ILE:C         1:A:26:ILE:N         6           (1,100)         1:A:88:VAL:N         1:A:88:VAL:CA         1:A:88:VAL:C         1:A:89:TYR:N         6           (1,60)         1:A:46:ARG:N         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:C         1:A:47:ILE:N         4           (1,138)         1:A:114:HIS:N         1:A:114:HIS:CA         1:A:114:HIS:C         1:A:115:ALA:N         19           (1,96)         1:A:86:SER:N         1:A:86:SER:CA         1:A:86:SER:C         1:A:87:TRP:N         16           (1,130)         1:A:110:LEU:N         1:A:110:LEU:CA         1:A:110:LEU:C         1:A:111:GLU:N         14           (1,130)         1:A:110:LEU:N         1:A:110:LEU:CA         1:A:110:LEU:C         1:A:111:GLU:N         12	1.75 1.75 1.74 1.74 1.69
(1,100)       1:A:88:VAL:N       1:A:88:VAL:CA       1:A:88:VAL:C       1:A:89:TYR:N       6         (1,60)       1:A:46:ARG:N       1:A:46:ARG:CA       1:A:46:ARG:C       1:A:47:ILE:N       4         (1,138)       1:A:114:HIS:N       1:A:114:HIS:CA       1:A:114:HIS:C       1:A:115:ALA:N       19         (1,96)       1:A:86:SER:N       1:A:86:SER:CA       1:A:86:SER:C       1:A:87:TRP:N       16         (1,130)       1:A:110:LEU:N       1:A:110:LEU:CA       1:A:110:LEU:C       1:A:111:GLU:N       14         (1,130)       1:A:110:LEU:N       1:A:110:LEU:CA       1:A:110:LEU:C       1:A:111:GLU:N       12	1.75 1.74 1.74 1.69
(1,60)         1:A:46:ARG:N         1:A:46:ARG:CA         1:A:46:ARG:C         1:A:47:ILE:N         4           (1,138)         1:A:114:HIS:N         1:A:114:HIS:CA         1:A:114:HIS:C         1:A:115:ALA:N         19           (1,96)         1:A:86:SER:N         1:A:86:SER:CA         1:A:86:SER:C         1:A:87:TRP:N         16           (1,130)         1:A:110:LEU:N         1:A:110:LEU:CA         1:A:110:LEU:C         1:A:111:GLU:N         14           (1,130)         1:A:110:LEU:N         1:A:110:LEU:CA         1:A:110:LEU:C         1:A:111:GLU:N         12	1.74 1.74 1.69
(1,138)       1:A:114:HIS:N       1:A:114:HIS:CA       1:A:114:HIS:C       1:A:115:ALA:N       19         (1,96)       1:A:86:SER:N       1:A:86:SER:CA       1:A:86:SER:C       1:A:87:TRP:N       16         (1,130)       1:A:110:LEU:N       1:A:110:LEU:CA       1:A:110:LEU:C       1:A:111:GLU:N       14         (1,130)       1:A:110:LEU:N       1:A:110:LEU:CA       1:A:110:LEU:C       1:A:111:GLU:N       12	1.74 1.69
(1,96)         1:A:86:SER:N         1:A:86:SER:CA         1:A:86:SER:C         1:A:87:TRP:N         16           (1,130)         1:A:110:LEU:N         1:A:110:LEU:CA         1:A:110:LEU:C         1:A:111:GLU:N         14           (1,130)         1:A:110:LEU:N         1:A:110:LEU:CA         1:A:110:LEU:C         1:A:111:GLU:N         12	1.69
(1,130)     1:A:110:LEU:N     1:A:110:LEU:CA     1:A:110:LEU:C     1:A:111:GLU:N     14       (1,130)     1:A:110:LEU:N     1:A:110:LEU:CA     1:A:110:LEU:C     1:A:111:GLU:N     12	
(1,130) 1:A:110:LEU:N 1:A:110:LEU:CA 1:A:110:LEU:C 1:A:111:GLU:N 12	1.69
	1.00
(1.48) 1:A:36:GLU:N 1:A:36:GLU:CA 1:A:36:GLU:C 1:A:37·VAI:N 12	1.68
(±,±0,   ±:::::::::::::::::::::::::::::::::::	1.67
(1,165) 1:A:128:GLY:C 1:A:129:TRP:N 1:A:129:TRP:CA 1:A:129:TRP:C 19	1.65
(1,134) 1:A:112:LEU:N 1:A:112:LEU:CA 1:A:112:LEU:C 1:A:113:GLU:N 7	1.64
(1,100) 1:A:88:VAL:N 1:A:88:VAL:CA 1:A:88:VAL:C 1:A:89:TYR:N 8	1.63
(1,40) 1:A:29:ARG:N 1:A:29:ARG:CA 1:A:29:ARG:C 1:A:30:TYR:N 4	1.62
(1,106) 1:A:97:VAL:N 1:A:97:VAL:CA 1:A:97:VAL:C 1:A:98:GLU:N 18	1.61
(1,135) 1:A:112:LEU:C 1:A:113:GLU:N 1:A:113:GLU:CA 1:A:113:GLU:C 16	1.6
(1,107) 1:A:97:VAL:C 1:A:98:GLU:N 1:A:98:GLU:CA 1:A:98:GLU:C 3	1.59
(1,104) 1:A:96:GLU:N 1:A:96:GLU:CA 1:A:96:GLU:C 1:A:97:VAL:N 17	1.59
(1,100) 1:A:88:VAL:N 1:A:88:VAL:CA 1:A:88:VAL:C 1:A:89:TYR:N 17	1.59
(1,100) 1:A:88:VAL:N 1:A:88:VAL:CA 1:A:88:VAL:C 1:A:89:TYR:N 4	1.57
(1,30) 1:A:24:ILE:N 1:A:24:ILE:CA 1:A:24:ILE:C 1:A:25:ILE:N 2	1.56
(1,58) 1:A:45:ASN:N 1:A:45:ASN:CA 1:A:45:ASN:C 1:A:46:ARG:N 15	1.55
(1,16) 1:A:14:ARG:N 1:A:14:ARG:CA 1:A:14:ARG:C 1:A:15:THR:N 10	1.55
(1,106) 1:A:97:VAL:N 1:A:97:VAL:CA 1:A:97:VAL:C 1:A:98:GLU:N 10	1.55
(1,90) 1:A:83:LEU:N 1:A:83:LEU:CA 1:A:83:LEU:C 1:A:84:THR:N 6	1.53
(1,37) 1:A:27:ARG:C 1:A:28:GLN:N 1:A:28:GLN:CA 1:A:28:GLN:C 2	1.52
(1,174) 1:A:133:LEU:N 1:A:133:LEU:CA 1:A:133:LEU:C 1:A:134:ASP:N 13	1.52
(1,26) 1:A:21:ALA:N 1:A:21:ALA:CA 1:A:21:ALA:C 1:A:22:ARG:N 18	1.51
(1,90) 1:A:83:LEU:N 1:A:83:LEU:CA 1:A:83:LEU:C 1:A:84:THR:N 5	1.5
(1,29) 1:A:23:SER:C 1:A:24:ILE:N 1:A:24:ILE:C 4	1.49
(1,37) 1:A:27:ARG:C 1:A:28:GLN:N 1:A:28:GLN:CA 1:A:28:GLN:C 8	1.48
(1,95) 1:A:85:ILE:C 1:A:86:SER:N 1:A:86:SER:CA 1:A:86:SER:C 17	1.46
(1,84) 1:A:77:CYS:N 1:A:77:CYS:CA 1:A:77:CYS:C 1:A:78:GLU:N 17	1.46
(1,75) 1:A:64:PHE:C 1:A:65:ALA:N 1:A:65:ALA:CA 1:A:65:ALA:C 18	1.46
(1,36) 1:A:27:ARG:N 1:A:27:ARG:CA 1:A:28:GLN:N 2	1.46
(1,16) 1:A:14:ARG:N 1:A:14:ARG:CA 1:A:14:ARG:C 1:A:15:THR:N 16	1.46
(1,90) 1:A:83:LEU:N 1:A:83:LEU:CA 1:A:83:LEU:C 1:A:84:THR:N 13	1.45



	ed from previous p					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( $\circ$ )
(1,90)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:THR:N	19	1.44
(1,29)	1:A:23:SER:C	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	5	1.44
(1,29)	1:A:23:SER:C	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	19	1.43
(1,28)	1:A:22:ARG:N	1:A:22:ARG:CA	1:A:22:ARG:C	1:A:23:SER:N	12	1.41
(1,122)	1:A:105:GLY:N	1:A:105:GLY:CA	1:A:105:GLY:C	1:A:106:ASP:N	18	1.38
(1,40)	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	18	1.36
(1,188)	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	1:A:141:ARG:N	10	1.35
(1,95)	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	19	1.33
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	13	1.33
(1,37)	1:A:27:ARG:C	1:A:28:GLN:N	1:A:28:GLN:CA	1:A:28:GLN:C	17	1.32
(1,88)	1:A:82:ARG:N	1:A:82:ARG:CA	1:A:82:ARG:C	1:A:83:LEU:N	15	1.3
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	1	1.29
(1,5)	1:A:8:GLU:C	1:A:9:ARG:N	1:A:9:ARG:CA	1:A:9:ARG:C	17	1.28
(1,216)	1:A:175:ALA:N	1:A:175:ALA:CA	1:A:175:ALA:C	1:A:176:ALA:N	5	1.28
(1,130)	1:A:110:LEU:N	1:A:110:LEU:CA	1:A:110:LEU:C	1:A:111:GLU:N	20	1.28
(1,165)	1:A:128:GLY:C	1:A:129:TRP:N	1:A:129:TRP:CA	1:A:129:TRP:C	4	1.27
(1,104)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:VAL:N	15	1.27
(1,127)	1:A:108:THR:C	1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CA	1:A:109:LEU:C	2	1.26
(1,105)	1:A:96:GLU:C	1:A:97:VAL:N	1:A:97:VAL:CA	1:A:97:VAL:C	7	1.25
(1,100)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:TYR:N	7	1.25
(1,4)	1:A:8:GLU:N	1:A:8:GLU:CA	1:A:8:GLU:C	1:A:9:ARG:N	3	1.24
(1,123)	1:A:106:ASP:C	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	8	1.24
(1,48)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:VAL:N	11	1.23
(1,127)	1:A:108:THR:C	1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CA	1:A:109:LEU:C	15	1.23
(1,75)	1:A:64:PHE:C	1:A:65:ALA:N	1:A:65:ALA:CA	1:A:65:ALA:C	9	1.2
(1,30)	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	1:A:25:ILE:N	5	1.2
(1,30)	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	1:A:25:ILE:N	20	1.2
(1,29)	1:A:23:SER:C	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	7	1.2
(1,19)	1:A:15:THR:C	1:A:16:ILE:N	1:A:16:ILE:CA	1:A:16:ILE:C	9	1.2
(1,100)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:TYR:N	14	1.2
(1,48)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:VAL:N	15	1.19
(1,108)	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	1:A:99:LEU:N	4	1.17
(1,172)	1:A:132:ALA:N	1:A:132:ALA:CA	1:A:132:ALA:C	1:A:133:LEU:N	14	1.12
(1,122)	1:A:105:GLY:N	1:A:105:GLY:CA	1:A:105:GLY:C	1:A:106:ASP:N	2	1.12
(1,100)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:TYR:N	11	1.12
(1,75)	1:A:64:PHE:C	1:A:65:ALA:N	1:A:65:ALA:CA	1:A:65:ALA:C	7	1.11
(1,188)	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	1:A:141:ARG:N	2	1.11
(1,108)	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	1:A:99:LEU:N	11	1.11
(1,172)	1:A:132:ALA:N	1:A:132:ALA:CA	1:A:132:ALA:C	1:A:133:LEU:N	6	1.1
(1,33)	1:A:25:ILE:C	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	9	1.09
(1,85)	1:A:77:CYS:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	9	1.08
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	2	1.08
(1,40)	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	2	1.07
(1,106)	1:A:97:VAL:N	1:A:97:VAL:CA	1:A:97:VAL:C	1:A:98:GLU:N	20	1.07
(1,174)	1:A:133:LEU:N	1:A:133:LEU:CA	1:A:133:LEU:C	1:A:134:ASP:N	19	1.05
(1,98)	1:A:87:TRP:N	1:A:87:TRP:CA	1:A:87:TRP:C	1:A:88:VAL:N	6	1.04
(1,75)	1:A:64:PHE:C	1:A:65:ALA:N	1:A:65:ALA:CA	1:A:65:ALA:C	15	1.04
(1,106)	1:A:97:VAL:N	1:A:97:VAL:CA	1:A:97:VAL:C	1:A:98:GLU:N	11	1.03
(1,100)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:TYR:N	16	1.03
(1,88)	1:A:82:ARG:N	1:A:82:ARG:CA	1:A:82:ARG:C	1:A:83:LEU:N	4	1.02
(1,37)	1:A:27:ARG:C	1:A:28:GLN:N	1:A:28:GLN:CA	1:A:28:GLN:C	1	1.02



Key	$rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( o )
(1,127)	1:A:108:THR:C	1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CA	1:A:109:LEU:C	17	1.02
(1,214)	1:A:174:TRP:N	1:A:174:TRP:CA	1:A:174:TRP:C	1:A:175:ALA:N	15	1.01
(1,72)	1:A:63:ASN:N	1:A:63:ASN:CA	1:A:63:ASN:C	1:A:64:PHE:N	2	1.0
(1,138)	1:A:114:HIS:N	1:A:114:HIS:CA	1:A:114:HIS:C	1:A:115:ALA:N	17	0.99
(1,108)	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	1:A:99:LEU:N	12	0.99
(1,129)	1:A:109:LEU:C	1:A:110:LEU:N	1:A:110:LEU:CA	1:A:110:LEU:C	1	0.98
(1,127)	1:A:108:THR:C	1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CA	1:A:109:LEU:C	4	0.96
(1,106)	1:A:97:VAL:N	1:A:97:VAL:CA	1:A:97:VAL:C	1:A:98:GLU:N	8	0.95
(1,134)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:GLU:N	9	0.94
(1,172)	1:A:132:ALA:N	1:A:132:ALA:CA	1:A:132:ALA:C	1:A:133:LEU:N	12	0.92
(1,164)	1:A:128:GLY:N	1:A:128:GLY:CA	1:A:128:GLY:C	1:A:129:TRP:N	18	0.92
(1,85)	1:A:77:CYS:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	13	0.91
(1,80)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:ARG:N	8	0.91
(1,24)	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1:A:21:ALA:N	15	0.91
(1,24)	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1:A:21:ALA:N	20	0.91
(1,214)	1:A:174:TRP:N	1:A:174:TRP:CA	1:A:174:TRP:C	1:A:175:ALA:N	20	0.91
(1,10)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	11	0.9
(1,135)	1:A:112:LEU:C	1:A:113:GLU:N	1:A:113:GLU:CA	1:A:113:GLU:C	6	0.89
(1,105) $(1,105)$	1:A:96:GLU:C	1:A:97:VAL:N	1:A:97:VAL:CA	1:A:97:VAL:C	16	0.89
(1,208)	1:A:171:GLY:N	1:A:171:GLY:CA	1:A:171:GLY:C	1:A:172:GLU:N	20	0.88
(1,77)	1:A:73:ASP:C	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	5	0.87
(1,73)	1:A:63:ASN:C	1:A:64:PHE:N	1:A:64:PHE:CA	1:A:64:PHE:C	11	0.87
(1,208)	1:A:171:GLY:N	1:A:171:GLY:CA	1:A:171:GLY:C	1:A:172:GLU:N	14	0.87
(1,105)	1:A:96:GLU:C	1:A:97:VAL:N	1:A:97:VAL:CA	1:A:97:VAL:C	17	0.87
(1,48)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:VAL:N	18	0.86
(1,188)	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	1:A:141:ARG:N	19	0.86
(1,173)	1:A:132:ALA:C	1:A:133:LEU:N	1:A:133:LEU:CA	1:A:133:LEU:C	2	0.86
(1,1)	1:A:6:ALA:C	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	9	0.86
(1,79)	1:A:74:ILE:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	6	0.85
(1,123)	1:A:106:ASP:C	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	3	0.84
(1,30)	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	1:A:25:ILE:N	8	0.83
(1,15)	1:A:13:ARG:C	1:A:14:ARG:N	1:A:14:ARG:CA	1:A:14:ARG:C	12	0.83
(1,13)	1:A:12:GLY:C	1:A:13:ARG:N	1:A:13:ARG:CA	1:A:13:ARG:C	17	0.82
(1,138)	1:A:114:HIS:N	1:A:114:HIS:CA	1:A:114:HIS:C	1:A:115:ALA:N	1	0.81
(1,127)	1:A:108:THR:C	1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CA	1:A:109:LEU:C	18	0.81
(1,82)	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	1:A:77:CYS:N	7	0.79
(1,29)	1:A:23:SER:C	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	3	0.79
(1,127)	1:A:108:THR:C	1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CA	1:A:109:LEU:C	8	0.79
(1,65)	1:A:51:PHE:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	4	0.78
(1,138)	1:A:114:HIS:N	1:A:114:HIS:CA	1:A:114:HIS:C	1:A:115:ALA:N	18	0.77
(1,130)	1:A:110:LEU:N	1:A:110:LEU:CA	1:A:110:LEU:C	1:A:111:GLU:N	16	0.77
(1,190)	1:A:162:GLU:N	1:A:162:GLU:CA	1:A:162:GLU:C	1:A:163:MET:N	12	0.76
(1,8)	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	9	0.75
(1,30)	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	1:A:25:ILE:N	19	0.75
(1,30)	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	1:A:25:ILE:N	14	0.74
(1,204)	1:A:169:GLU:N	1:A:169:GLU:CA	1:A:169:GLU:C	1:A:170:ARG:N	6	0.73
(1,82)	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	1:A:77:CYS:N	6	0.72
(1,32)	1:A:25:ILE:N	1:A:25:ILE:CA	1:A:25:ILE:C	1:A:26:ILE:N	12	0.72
(1,106)	1:A:97:VAL:N	1:A:97:VAL:CA	1:A:97:VAL:C	1:A:98:GLU:N	9	0.72
,	1:A:28:GLN:C	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	19	0.71
(1,39)						



	ed from previous pe		A		3.6.1.1	<b>T</b> 71 1 11 ( )
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,148)	1:A:120:GLN:N	1:A:120:GLN:CA	1:A:120:GLN:C	1:A:121:MET:N	10	0.7
(1,82)	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	1:A:77:CYS:N	1	0.69
(1,73)	1:A:63:ASN:C	1:A:64:PHE:N	1:A:64:PHE:CA	1:A:64:PHE:C	16	0.68
(1,164)	1:A:128:GLY:N	1:A:128:GLY:CA	1:A:128:GLY:C	1:A:129:TRP:N	11	0.68
(1,190)	1:A:162:GLU:N	1:A:162:GLU:CA	1:A:162:GLU:C	1:A:163:MET:N	8	0.67
(1,8)	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	4	0.66
(1,35)	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	1:A:27:ARG:CA	1:A:27:ARG:C	4	0.66
(1,4)	1:A:8:GLU:N	1:A:8:GLU:CA	1:A:8:GLU:C	1:A:9:ARG:N	2	0.65
(1,214)	1:A:174:TRP:N	1:A:174:TRP:CA	1:A:174:TRP:C	1:A:175:ALA:N	5	0.64
(1,140)	1:A:115:ALA:N	1:A:115:ALA:CA	1:A:115:ALA:C	1:A:116:THR:N	13	0.63
(1,122)	1:A:105:GLY:N	1:A:105:GLY:CA	1:A:105:GLY:C	1:A:106:ASP:N	6	0.63
(1,77)	1:A:73:ASP:C	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	13	0.62
(1,134)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:GLU:N	14	0.62
(1,126)	1:A:108:THR:N	1:A:108:THR:CA	1:A:108:THR:C	1:A:109:LEU:N	16	0.62
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	11	0.6
(1,208)	1:A:171:GLY:N	1:A:171:GLY:CA	1:A:171:GLY:C	1:A:172:GLU:N	8	0.6
(1,103)	1:A:95:SER:C	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	5	0.6
(1,65)	1:A:51:PHE:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	10	0.59
(1,201)	1:A:167:SER:C	1:A:168:GLN:N	1:A:168:GLN:CA	1:A:168:GLN:C	9	0.59
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	15	0.58
(1,48)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:VAL:N	3	0.57
(1,74)	1:A:64:PHE:N	1:A:64:PHE:CA	1:A:64:PHE:C	1:A:65:ALA:N	20	0.56
(1,221)	1:A:177:LEU:C	1:A:178:VAL:N	1:A:178:VAL:CA	1:A:178:VAL:C	13	0.56
(1,95)	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	4	0.55
(1,82)	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	1:A:77:CYS:N	17	0.54
(1,82)	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	1:A:77:CYS:N	14	0.53
(1,72)	1:A:63:ASN:N	1:A:63:ASN:CA	1:A:63:ASN:C	1:A:64:PHE:N	20	0.53
(1,210)	1:A:172:GLU:N	1:A:172:GLU:CA	1:A:172:GLU:C	1:A:173:ALA:N	20	0.53
(1,10)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	1	0.53
(1,98)	1:A:87:TRP:N	1:A:87:TRP:CA	1:A:87:TRP:C	1:A:88:VAL:N	20	0.49
(1,48)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:VAL:N	9	0.49
(1,29)	1:A:23:SER:C	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	17	0.48
(1,208)	1:A:171:GLY:N	1:A:171:GLY:CA	1:A:171:GLY:C	1:A:172:GLU:N	2	0.48
(1,1)	1:A:6:ALA:C	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	2	0.48
(1,83)	1:A:76:ARG:C	1:A:77:CYS:N	1:A:77:CYS:CA	1:A:77:CYS:C	13	0.47
(1,122)	1:A:105:GLY:N	1:A:105:GLY:CA	1:A:105:GLY:C	1:A:106:ASP:N	8	0.47
(1,48)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:VAL:N	14	0.46
(1,92)	1:A:84:THR:N	1:A:84:THR:CA	1:A:84:THR:C	1:A:85:ILE:N	16	0.45
(1,88)	1:A:82:ARG:N	1:A:82:ARG:CA	1:A:82:ARG:C	1:A:83:LEU:N	11	0.45
(1,40)	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	16	0.45
(1,30)	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	1:A:25:ILE:N	17	0.45
(1,36) $(1,26)$	1:A:21:ALA:N	1:A:21:ALA:CA	1:A:21:ALA:C	1:A:22:ARG:N	13	0.45
(1,180)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	1:A:137:GLY:N	9	0.44
(1,122)	1:A:105:GLY:N	1:A:105:GLY:CA	1:A:105:GLY:C	1:A:106:ASP:N	14	0.44
(1,122) $(1,100)$	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:TYR:N	5	0.44
(1,178)	1:A:135:PHE:N	1:A:135:PHE:CA	1:A:135:PHE:C	1:A:136:LEU:N	5	0.43
(1,178) $(1,15)$	1:A:13:ARG:C	1:A:14:ARG:N	1:A:14:ARG:CA	1:A:14:ARG:C	3	0.43
(1,13) $(1,122)$	1:A:105:GLY:N	1:A:105:GLY:CA	1:A:105:GLY:C	1:A:106:ASP:N	16	0.43
(1,122) $(1,110)$	1:A:103.GL1.N 1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:ASI :N 1:A:100:ARG:N	16	0.4
(1,170) $(1,174)$	1:A:133:LEU:N	1:A:133:LEU:CA	1:A:133:LEU:C	1:A:134:ASP:N	2	0.39
(1,174) $(1,82)$	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	1:A:77:CYS:N	4	0.38
(1,02)	I:A:/0:AKG:N	1:A:70:AnG:UA	1:A:10:AKG:U	1:A:11:O15:N		0.38



Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ\ )$
(1,208)	1:A:171:GLY:N	1:A:171:GLY:CA	1:A:171:GLY:C	1:A:172:GLU:N	6	0.38
(1,148)	1:A:120:GLN:N	1:A:120:GLN:CA	1:A:120:GLN:C	1:A:121:MET:N	18	0.37
(1,43)	1:A:33:PRO:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	7	0.35
(1,173)	1:A:132:ALA:C	1:A:133:LEU:N	1:A:133:LEU:CA	1:A:133:LEU:C	19	0.35
(1,135)	1:A:112:LEU:C	1:A:113:GLU:N	1:A:113:GLU:CA	1:A:113:GLU:C	20	0.35
(1,33)	1:A:25:ILE:C	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	13	0.33
(1,161)	1:A:126:GLY:C	1:A:127:VAL:N	1:A:127:VAL:CA	1:A:127:VAL:C	20	0.33
(1,164)	1:A:128:GLY:N	1:A:128:GLY:CA	1:A:128:GLY:C	1:A:129:TRP:N	7	0.32
(1,140)	1:A:115:ALA:N	1:A:115:ALA:CA	1:A:115:ALA:C	1:A:116:THR:N	2	0.32
(1,91)	1:A:83:LEU:C	1:A:84:THR:N	1:A:84:THR:CA	1:A:84:THR:C	5	0.31
(1,30)	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	1:A:25:ILE:N	7	0.31
(1,33)	1:A:25:ILE:C	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	12	0.3
(1,190)	1:A:162:GLU:N	1:A:162:GLU:CA	1:A:162:GLU:C	1:A:163:MET:N	3	0.3
(1,164)	1:A:128:GLY:N	1:A:128:GLY:CA	1:A:128:GLY:C	1:A:129:TRP:N	20	0.3
(1,72)	1:A:63:ASN:N	1:A:63:ASN:CA	1:A:63:ASN:C	1:A:64:PHE:N	19	0.29
(1,19)	1:A:15:THR:C	1:A:16:ILE:N	1:A:16:ILE:CA	1:A:16:ILE:C	11	0.29
(1,26)	1:A:21:ALA:N	1:A:21:ALA:CA	1:A:21:ALA:C	1:A:22:ARG:N	8	0.28
(1,15)	1:A:13:ARG:C	1:A:14:ARG:N	1:A:14:ARG:CA	1:A:14:ARG:C	7	0.28
(1,107)	1:A:97:VAL:C	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	10	0.28
(1,80)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:ARG:N	6	0.27
(1,74)	1:A:64:PHE:N	1:A:64:PHE:CA	1:A:64:PHE:C	1:A:65:ALA:N	11	0.27
(1,190)	1:A:162:GLU:N	1:A:162:GLU:CA	1:A:162:GLU:C	1:A:163:MET:N	15	0.26
(1,149)	1:A:120:GLN:C	1:A:121:MET:N	1:A:121:MET:CA	1:A:121:MET:C	16	0.26
(1,127)	1:A:108:THR:C	1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CA	1:A:109:LEU:C	20	0.26
(1,108)	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	1:A:99:LEU:N	8	0.26
(1,148)	1:A:120:GLN:N	1:A:120:GLN:CA	1:A:120:GLN:C	1:A:121:MET:N	9	0.24
(1,138)	1:A:114:HIS:N	1:A:114:HIS:CA	1:A:114:HIS:C	1:A:115:ALA:N	13	0.15
(1,213)	1:A:173:ALA:C	1:A:174:TRP:N	1:A:174:TRP:CA	1:A:174:TRP:C	11	0.14
(1,136)	1:A:113:GLU:N	1:A:113:GLU:CA	1:A:113:GLU:C	1:A:114:HIS:N	13	0.13
(1,60)	1:A:46:ARG:N	1:A:46:ARG:CA	1:A:46:ARG:C	1:A:47:ILE:N	6	0.11
(1,190)	1:A:162:GLU:N	1:A:162:GLU:CA	1:A:162:GLU:C	1:A:163:MET:N	10	0.11
(1,214)	1:A:174:TRP:N	1:A:174:TRP:CA	1:A:174:TRP:C	1:A:175:ALA:N	3	0.1
(1,89)	1:A:82:ARG:C	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	3	0.09
(1,29)	1:A:23:SER:C	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	13	0.08
(1,90)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:THR:N	1	0.04
(1,66)	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	1:A:53:GLU:N	3	0.04
(1,40)	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	11	0.03

