

wwPDB NMR Structure Validation Summary Report (i)

Apr 2, 2020 – 11:22 AM CDT

PDB ID : 2PNG

Title: Type I rat fatty acid synthase acyl carrier protein (ACP) domain

Authors: Ploskon, E.A.; Arthur, C.J.; Evans, S.E.; Williams, C.; Crosby, J.; Crump,

M.P.

Deposited on : 2007-04-24

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)

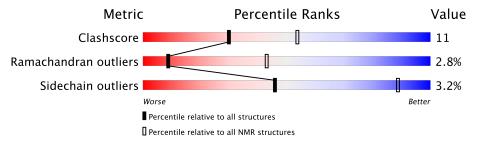
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.6.dev1

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 53%.

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



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

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

| Mol | Chain | Length | Quality of chain | | | |
|-----|-------|--------|------------------|-----|-----|--|
| 1 | ٨ | 0.0 | | | | |
| 1 | А | 89 | 60% | 16% | 25% | |



2 Ensemble composition and analysis (i)

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

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

| Well-defined (core) protein residues | | | | | | |
|--------------------------------------|--|------|---|--|--|--|
| Well-defined core | Well-defined core Residue range (total) Backbone RMSD (Å) Medoid model | | | | | |
| 1 | A:8-A:74 (67) | 0.52 | 1 | | | |

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

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

The models can be grouped into 3 clusters and 1 single-model cluster was found.

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



3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1386 atoms, of which 708 are hydrogens and 0 are deuteriums.

• Molecule 1 is a protein called Fatty acid synthase (EC 2.3.1.85).

| Mol | Chain | Residues | | \mathbf{Atoms} | | | | Trace | |
|-----|-------|----------|-------|------------------|-----|-----|-----|-------|---|
| 1 | Λ | 90 | Total | С | Н | N | О | S | 0 |
| 1 | А | 89 | 1386 | 416 | 708 | 125 | 135 | 2 | U |

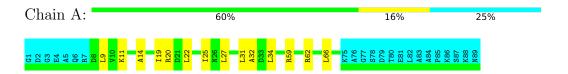


4 Residue-property plots (i)

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: Fatty acid synthase (EC 2.3.1.85)



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

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

• Molecule 1: Fatty acid synthase (EC 2.3.1.85)





5 Refinement protocol and experimental data overview (i)



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

Of the 200 calculated structures, 30 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 | 1.1 |
| Aria | structure solution | 1.2 |

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

| Chemical shift file(s) | 2png_nmr.cif |
|--|--------------|
| Number of chemical shift lists | 1 |
| Total number of shifts | 980 |
| Number of shifts mapped to atoms | 558 |
| Number of unparsed shifts | 156 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 266 |
| Assignment completeness (well-defined parts) | 53% |

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.

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

| Mol | Chain | Chirality | Planarity |
|-----|-------|-------------|---------------|
| 1 | A | 0.0 ± 0.0 | 0.6 ± 0.7 |
| All | All | 0 | 19 |

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

| Mol | Chain | Res | Type | Group | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|-----------|----------------|
| 1 | A | 45 | ARG | Sidechain | 6 |
| 1 | A | 59 | ARG | Sidechain | 5 |
| 1 | A | 67 | ARG | Sidechain | 5 |
| 1 | A | 20 | ARG | Sidechain | 2 |
| 1 | A | 62 | ARG | Sidechain | 1 |

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 | 522 | 556 | 554 | 12±3 |
| All | All | 15660 | 16680 | 16620 | 352 |

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

5 of 122 unique clashes are listed below, sorted by their clash magnitude.



| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | ${f Models}$ | |
|-----------------|-----------------|----------|-------------|--------------|-------|
| Atom-1 | Atom-2 | Clash(A) | Distance(A) | Worst | Total |
| 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HG2 | 0.89 | 1.45 | 13 | 6 |
| 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:34:LEU:HD12 | 0.79 | 1.54 | 4 | 9 |
| 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:62:ARG:HG2 | 0.79 | 1.53 | 24 | 8 |
| 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:67:ARG:HG2 | 0.72 | 1.62 | 10 | 2 |
| 1:A:22:LEU:HG | 1:A:27:LEU:HD21 | 0.72 | 1.62 | 14 | 6 |

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 | Percentiles |
|-----|-------|-----------------|--------------|-------------|------------|-------------|
| 1 | A | 67/89 (75%) | 56±2 (84±3%) | 9±2 (13±3%) | 2±1 (3±2%) | 9 43 |
| All | All | 2010/2670 (75%) | 1687 (84%) | 266 (13%) | 57 (3%) | 9 43 |

5 of 13 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 | 20 | ARG | 22 |
| 1 | A | 35 | GLY | 10 |
| 1 | A | 38 | SER | 8 |
| 1 | A | 37 | ASP | 5 |
| 1 | A | 41 | GLY | 2 |

6.3.2 Protein sidechains (i)

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

| Mol | Chain | Analysed | Rotameric | Outliers | Percentiles | | |
|-----|-------|-----------------|--------------|------------|-------------|--|--|
| 1 | A | 59/74 (80%) | 57±1 (97±2%) | 2±1 (3±2%) | 46 89 | | |
| All | All | 1770/2220 (80%) | 1713 (97%) | 57 (3%) | 46 89 | | |



5 of 12 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 | 59 | ARG | 18 |
| 1 | A | 11 | LYS | 10 |
| 1 | A | 63 | GLN | 9 |
| 1 | A | 66 | LEU | 8 |
| 1 | A | 34 | LEU | 3 |

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 53% for the well-defined parts and 51% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: 2png nmr.cif

Chemical shift list name: nef_chemical_shift_list_

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 | 980 |
|---|-----|
| Number of shifts mapped to atoms | 558 |
| Number of unparsed shifts | 156 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 266 |
| Number of shift outliers (ShiftChecker) | 0 |

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

• Chemical shift has been reported more than once. First 5 (of 156) occurrences are reported below.

| Shift ID | Chain | Res Type | | Type Atom | | Shift Dat | a |
|----------|-------|----------|------|-----------|-------|-------------|-----------|
| | Chain | nes | Type | Atom | Value | Uncertainty | Ambiguity |
| 9 | A | 4 | GLU | HG% | 2.208 | 0.000 | 1 |
| 17 | A | 5 | ALA | HB% | 1.348 | 0.000 | 1 |
| 18 | A | 5 | ALA | HB% | 1.348 | 0.000 | 1 |
| 40 | A | 7 | ARG | HD% | 3.121 | 0.000 | 1 |
| 42 | A | 7 | ARG | HG% | 1.599 | 0.000 | 1 |

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

• No matching atoms found in structure. First 5 (of 266) occurrences are reported below.

| Chain | Ros | Type | Atom | | Shift Dat | a |
|-------|------|------|------|-------|--------------------------|-----------|
| Chain | rtes | Type | Atom | Value | Shift Dat Uncertainty | Ambiguity |
| A | 9 | LEU | HD1% | 0.577 | 0.0 | 1 |
| A | 13 | VAL | HG2% | 0.986 | 0.0 | 1 |



Continued from previous page...

| Chain | Pag | Tuno | Atom | | Shift Dat | |
|-------|-----|------|------|-------|-------------|-----------|
| Chain | nes | туре | Atom | Value | Uncertainty | Ambiguity |
| A | 60 | GLU | HBy | 1.915 | 0.0 | 2 |
| A | 86 | LYS | HG% | 1.457 | 0.0 | 1 |
| A | 16 | ILE | HG1y | 1.224 | 0.0 | 2 |

7.1.2 Chemical shift referencing (i)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

| Nucleus | # values | Correction \pm precision, ppm | Suggested action |
|----------------------------|----------|-----------------------------------|-------------------------------------|
| $^{13}\mathrm{C}_{\alpha}$ | 87 | -0.36 ± 0.08 | None needed ($< 0.5 \text{ ppm}$) |
| $^{13}C_{\beta}$ | 80 | -0.10 ± 0.09 | None needed ($< 0.5 \text{ ppm}$) |
| ¹³ C′ | 0 | | None (insufficient data) |
| ^{15}N | 84 | -0.18 ± 0.37 | None needed (< 0.5 ppm) |

7.1.3 Completeness of resonance assignments (i)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 53%, i.e. 444 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 844. 16 out of 20 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | $^{1}\mathrm{H}$ | $^{13}\mathbf{C}$ | $^{15}{ m N}$ |
|-----------|--------------------|------------------|-------------------|---------------|
| Backbone | $260/333 \ (78\%)$ | 128/133 (96%) | 67/134 (50%) | 65/66 (98%) |
| Sidechain | 184/495 (37%) | 29/285 (10%) | 152/186 (82%) | 3/24 (12%) |
| Aromatic | 0/16 (0%) | 0/8 (0%) | 0/4 (0%) | 0/4 (0%) |
| Overall | 444/844 (53%) | 157/426 (37%) | 219/324 (68%) | 68/94 (72%) |

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts (i)

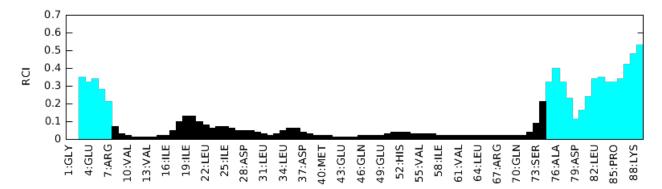
There are no statistically unusual chemical shifts.

7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots (i)

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



Random coil index (RCI) for chain A:





8 Distance restraints analysis

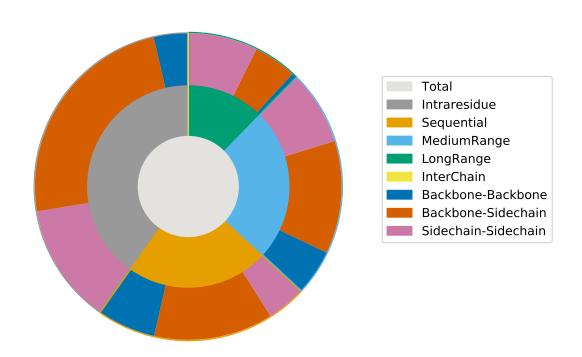
8.1 Distance restraints summary

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

| Dogtrointa turo | D D1(II4) | D C2(II4) | C C3(TI4) | Total | | |
|--|--|--|--------------|--------------|--------|--------|
| Restraints type | $\mathbf{B}\text{-}\mathbf{B}^1(\mathbf{H}^4)$ | $\mathbf{B}\text{-}\mathbf{S}^2(\mathbf{H}^4)$ | $S-S^3(H^4)$ | $Total(H^4)$ | RR^5 | $\%^6$ |
| Intraresidue (i-j =0) | 63(0) | 415(0) | 219(0) | 697(0) | 0.3 | 40.2 |
| Sequential (i-j =1) | 107(0) | 218(0) | 71(0) | 396(0) | 0.2 | 22.9 |
| Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$) | 83(0) | 206(0) | 136(0) | 425(0) | 0.2 | 24.5 |
| Long range (i-j ≥5) | 8(0) | 79(0) | 127(0) | 214(0) | 0.1 | 12.4 |
| Inter chain | 0(0) | 0(0) | 0(0) | 0(0) | 0.0 | 0.0 |
| Total | 261(0) | 918(0) | 553(0) | 1732(0) | 0.8 | 100.0 |

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

8.1.1 Pie chart: Distance restraints summary





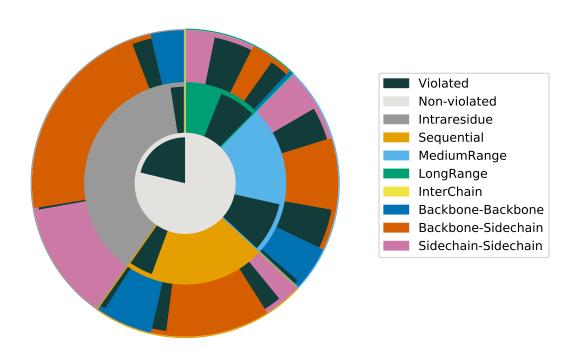
8.2 Distance violations summary

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

| Destroints to a | D D1(074) | $B-S^2(\%^4)$ | $S-S^3(\%^4)$ | Total | | | |
|--|--|----------------|---------------|---------------|--------|------------|--|
| Restraints type | $\mathbf{B}\text{-}\mathbf{B}^{1}(\%^{4})$ | D-3 (%) | S-S'(%) | $Total(\%^4)$ | RR^5 | % 6 | |
| Intraresidue ($ i-j =0$) | 1(1.6) | 37(8.9) | 4(1.8) | 42(6.0) | 0.0 | 11.4 | |
| Sequential (i-j =1) | 12(11.2) | 27(12.4) | 33(46.5) | 72(18.2) | 0.0 | 19.6 | |
| Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$) | 10(12.0) | 74(35.9) | 62(45.6) | 146(34.4) | 0.1 | 39.7 | |
| Long range (i-j ≥5) | 1(12.5) | 35(44.3) | 72(56.7) | 108(50.5) | 0.0 | 29.3 | |
| Inter chain | 0(0.0) | 0(0.0) | 0(0.0) | 0(0.0) | 0.0 | 0.0 | |
| Total | 24(9.2) | 173(18.8) | 171(30.9) | 368(21.2) | 0.2 | 100.0 | |

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

8.2.1 Pie-chart: Distance violations summary





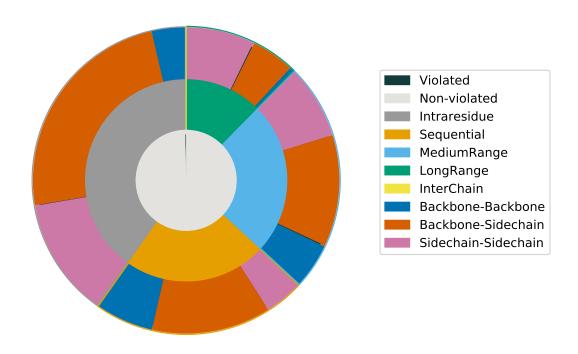
8.3 Consistent distance violations summary

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

| Dogtroints type | $B-B^{1}(\%^{4})$ | $B-S^2(\%^4)$ | $S-S^3(\%^4)$ | Total | | |
|--|-------------------|----------------|---------------|---------------|--------|--------|
| Restraints type | D-D (%) | D-3 (%) | S-S'(%) | $Total(\%^4)$ | RR^5 | $\%^6$ |
| Intraresidue ($ i-j =0$) | 0(0.0) | 0(0.0) | 1(0.5) | 1(0.1) | 0.0 | 20.0 |
| Sequential (i-j =1) | 0(0.0) | 0(0.0) | 0(0.0) | 0(0.0) | 0.0 | 0.0 |
| Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$) | 0(0.0) | 2(1.0) | 0(0.0) | 2(0.5) | 0.0 | 40.0 |
| Long range (i-j ≥5) | 0(0.0) | 0(0.0) | 2(1.6) | 2(0.9) | 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) | 2(0.2) | 3(0.5) | 5(0.3) | 0.0 | 100.0 |

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

8.3.1 Pie-chart: Consistent distance violations





8.4 Residual distance violations

Violation are counted in different bin sizes and listed below

| Range (Å) | Avg. No. of violated restraints per model | Max violation (Å) |
|-----------|---|-------------------|
| 0-0.2 | 64.5 | 0.2 |
| 0.2-0.5 | 7.7 | 0.5 |
| 0.5-1.0 | 7.0 | 1.0 |
| 1.0-2.0 | 4.3 | 1.99 |
| 2.0-5.0 | 0.1 | 3.01 |
| 5.0< | None | None |

8.5 Distance violations in ensemble

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

| 1 | No. of violated restraints | | $_{ m nts}$ | No. of sciolated madels | | |
|--------|----------------------------|--------|-------------|-------------------------|-------|------------------------|
| IR^1 | SQ^2 | MR^3 | LR^4 | IC^5 | Total | No. of violated models |
| 19 | 25 | 44 | 22 | 0 | 110 | 1 |
| 8 | 8 | 19 | 15 | 0 | 50 | 2 |
| 3 | 7 | 12 | 8 | 0 | 30 | 3 |
| 0 | 2 | 7 | 9 | 0 | 18 | 4 |
| 1 | 2 | 5 | 9 | 0 | 17 | 5 |
| 2 | 2 | 8 | 6 | 0 | 18 | 6 |
| 1 | 2 | 2 | 2 | 0 | 7 | 7 |
| 0 | 1 | 5 | 10 | 0 | 16 | 8 |
| 1 | 2 | 7 | 1 | 0 | 11 | 9 |
| 1 | 0 | 2 | 3 | 0 | 6 | 10 |
| 0 | 0 | 3 | 1 | 0 | 4 | 11 |
| 1 | 3 | 3 | 3 | 0 | 10 | 12 |
| 0 | 1 | 0 | 2 | 0 | 3 | 13 |
| 0 | 1 | 1 | 2 | 0 | 4 | 14 |
| 0 | 2 | 6 | 2 | 0 | 10 | 15 |
| 1 | 0 | 1 | 4 | 0 | 6 | 16 |
| 0 | 2 | 1 | 1 | 0 | 4 | 17 |
| 1 | 2 | 1 | 1 | 0 | 5 | 18 |
| 0 | 1 | 1 | 1 | 0 | 3 | 19 |
| 1 | 1 | 2 | 0 | 0 | 4 | 20 |
| 0 | 0 | 2 | 1 | 0 | 3 | 21 |
| 0 | 1 | 2 | 1 | 0 | 4 | 22 |
| 0 | 1 | 1 | 1 | 0 | 3 | 23 |
| 1 | 2 | 1 | 0 | 0 | 4 | 24 |
| 0 | 1 | 2 | 1 | 0 | 4 | 25 |
| 0 | 0 | 4 | 0 | 0 | 4 | 26 |

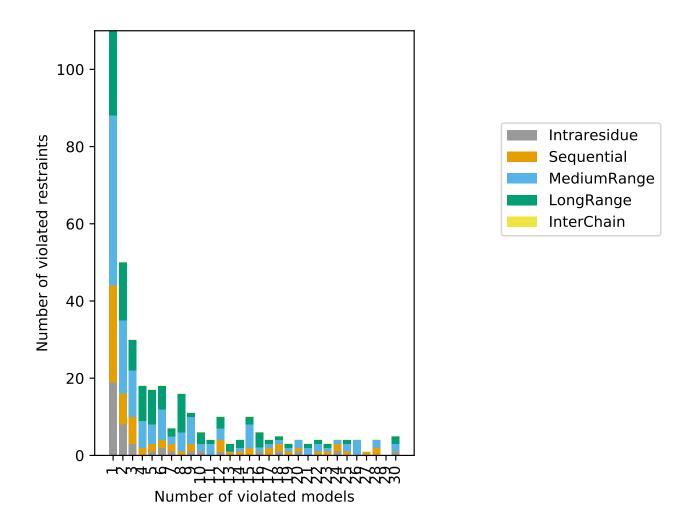


Continued from previous page...

| I | No. of | f violat | ted re | No. of violated models | | |
|--------|--------|----------|--------|------------------------|-------|------------------------|
| IR^1 | SQ^2 | MR^3 | LR^4 | IC^5 | Total | No. of violated models |
| 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 | 27 |
| 0 | 2 | 2 | 0 | 0 | 4 | 28 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 29 |
| 1 | 0 | 2 | 2 | 0 | 5 | 30 |

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

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



655 intraresidue restraints, 324 sequential restraints, 279 medium range restraints,106 long range restraints and 0 inter chain restraints are not violated. In total, 1364 restraints are not violated in any of the models



8.6 Violations in each model

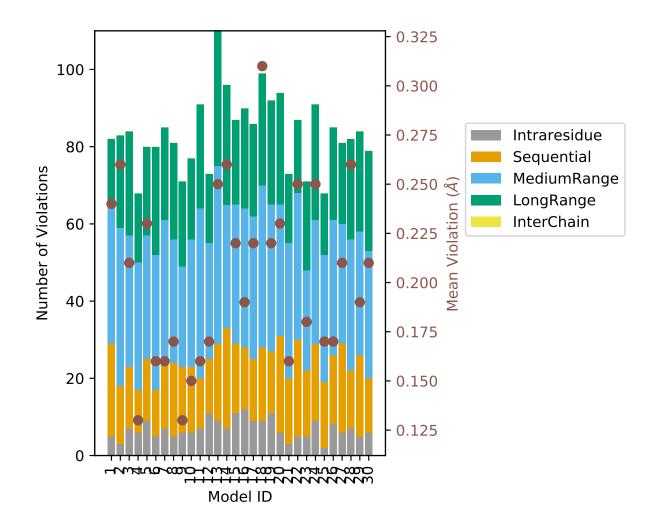
The following table lists the violation count in each model in the ensemble

| N/ 1 1 ID | | N | o. of v | violations | | | 3.5 | 7 (Å) |
|-----------|--------|--------|-----------------|------------|--------|-------|----------|---------|
| Model ID | IR^1 | SQ^2 | MR^3 | LR^4 | IC^5 | Total | Mean (Å) | Max (Å) |
| 1 | 5 | 24 | 36 | 17 | 0 | 82 | 0.24 | 1.58 |
| 2 | 3 | 15 | 41 | 24 | 0 | 83 | 0.26 | 3.01 |
| 3 | 7 | 16 | 34 | 27 | 0 | 84 | 0.21 | 1.56 |
| 4 | 6 | 11 | 33 | 18 | 0 | 68 | 0.13 | 1.72 |
| 5 | 9 | 16 | 32 | 23 | 0 | 80 | 0.23 | 1.62 |
| 6 | 5 | 12 | 35 | 28 | 0 | 80 | 0.16 | 1.56 |
| 7 | 7 | 18 | 36 | 24 | 0 | 85 | 0.16 | 1.39 |
| 8 | 5 | 19 | 32 | 25 | 0 | 81 | 0.17 | 1.62 |
| 9 | 6 | 17 | 26 | 22 | 0 | 71 | 0.13 | 1.64 |
| 10 | 6 | 17 | 33 | 21 | 0 | 77 | 0.15 | 1.51 |
| 11 | 7 | 13 | 44 | 27 | 0 | 91 | 0.16 | 1.62 |
| 12 | 11 | 14 | 30 | 18 | 0 | 73 | 0.17 | 1.52 |
| 13 | 9 | 20 | 46 | 35 | 0 | 110 | 0.25 | 1.87 |
| 14 | 7 | 26 | 32 | 31 | 0 | 96 | 0.26 | 2.01 |
| 15 | 11 | 18 | 36 | 22 | 0 | 87 | 0.22 | 1.65 |
| 16 | 12 | 16 | 36 | 26 | 0 | 90 | 0.19 | 1.66 |
| 17 | 9 | 16 | 37 | 24 | 0 | 86 | 0.22 | 1.89 |
| 18 | 9 | 19 | 42 | 29 | 0 | 99 | 0.31 | 1.88 |
| 19 | 11 | 16 | 38 | 27 | 0 | 92 | 0.22 | 1.72 |
| 20 | 6 | 25 | 34 | 29 | 0 | 94 | 0.23 | 1.51 |
| 21 | 3 | 17 | 35 | 18 | 0 | 73 | 0.16 | 1.82 |
| 22 | 5 | 25 | 38 | 19 | 0 | 87 | 0.25 | 1.67 |
| 23 | 5 | 17 | 26 | 23 | 0 | 71 | 0.18 | 1.71 |
| 24 | 9 | 20 | 32 | 30 | 0 | 91 | 0.25 | 2.1 |
| 25 | 2 | 17 | 33 | 16 | 0 | 68 | 0.17 | 1.59 |
| 26 | 8 | 18 | 35 | 24 | 0 | 85 | 0.17 | 1.96 |
| 27 | 6 | 23 | 31 | 21 | 0 | 81 | 0.21 | 1.98 |
| 28 | 7 | 15 | 34 | 26 | 0 | 82 | 0.26 | 1.72 |
| 29 | 5 | 21 | 32 | 26 | 0 | 84 | 0.19 | 1.72 |
| 30 | 6 | 14 | 33 | 26 | 0 | 79 | 0.21 | 1.57 |

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



8.6.1 Bar graph: Violations in each model

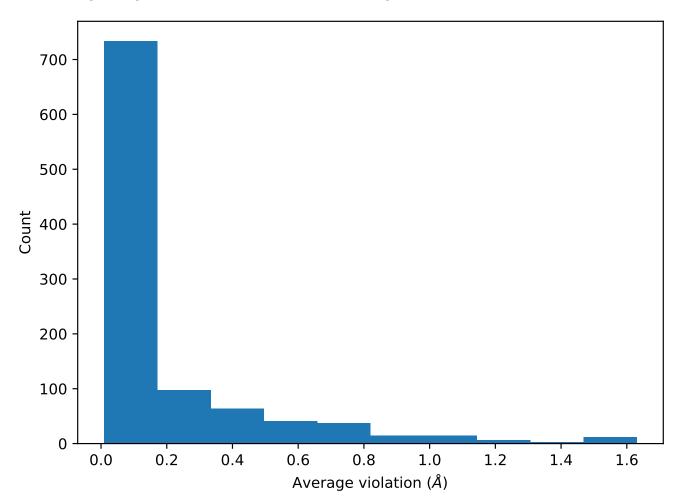




8.7 Most violated distance restraints

8.7.1 Histogram: Distribution of mean distance violations

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



8.7.2 Table: Most violated distance restraints

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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|-----------------|----------------|--------|----------|---------|
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 30 | 0.2 | 0.21 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 30 | 0.22 | 0.7 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 30 | 0.22 | 0.7 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 30 | 0.22 | 0.7 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:70:GLN:HG3 | 30 | 1.46 | 1.69 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:70:GLN:HG3 | 30 | 1.46 | 1.69 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|--------|----------|---------|
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:70:GLN:HG3 | 30 | 1.46 | 1.69 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:19:ILE:HB | 30 | 0.08 | 0.14 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:19:ILE:HB | 30 | 0.08 | 0.14 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:19:ILE:HB | 30 | 0.08 | 0.14 |
| (1,1271) | 1:A:62:ARG:HA | 1:A:58:ILE:HG12 | 30 | 0.86 | 1.34 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:69:LEU:H | 28 | 0.11 | 0.17 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:69:LEU:H | 28 | 0.11 | 0.17 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:69:LEU:H | 28 | 0.11 | 0.17 |
| (1,213) | 1:A:30:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HA | 28 | 0.06 | 0.13 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:65:THR:HA | 28 | 0.07 | 0.47 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:65:THR:HA | 28 | 0.07 | 0.47 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:65:THR:HA | 28 | 0.07 | 0.47 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG11 | 28 | 0.03 | 0.06 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG12 | 28 | 0.03 | 0.06 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG13 | 28 | 0.03 | 0.06 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG11 | 28 | 0.03 | 0.06 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG12 | 28 | 0.03 | 0.06 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG13 | 28 | 0.03 | 0.06 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG11 | 28 | 0.03 | 0.06 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG12 | 28 | 0.03 | 0.06 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG13 | 28 | 0.03 | 0.06 |
| (1,1710) | 1:A:63:GLN:H | 1:A:64:LEU:H | 27 | 0.04 | 0.08 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:20:ARG:HB2 | 26 | 0.17 | 0.5 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:20:ARG:HB2 | 26 | 0.17 | 0.5 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:20:ARG:HB2 | 26 | 0.17 | 0.5 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 26 | 0.18 | 0.74 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 26 | 0.18 | 0.74 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 26 | 0.18 | 0.74 |
| (1,1498) | 1:A:67:ARG:HD2 | 1:A:69:LEU:H | 26 | 0.05 | 0.08 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:31:LEU:HA | 26 | 0.09 | 0.13 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:31:LEU:HA | 26 | 0.09 | 0.13 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:31:LEU:HA | 26 | 0.09 | 0.13 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:70:GLN:HE21 | 25 | 0.37 | 1.36 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:70:GLN:HE21 | 25 | 0.37 | 1.36 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:70:GLN:HE21 | 25 | 0.37 | 1.36 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 25 | 0.33 | 0.71 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB3 | 1:A:64:LEU:H | 25 | 0.33 | 0.71 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:42:VAL:HA | 25 | 0.04 | 0.11 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:42:VAL:HA | 25 | 0.04 | 0.11 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:42:VAL:HA | 25 | 0.04 | 0.11 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HB2 | 25 | 0.05 | 0.35 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HG2 | 25 | 0.05 | 0.35 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|--------|----------|---------|
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD11 | 24 | 0.17 | 1.25 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD12 | 24 | 0.17 | 1.25 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD13 | 24 | 0.17 | 1.25 |
| (1,373) | 1:A:19:ILE:HB | 1:A:19:ILE:H | 24 | 0.02 | 0.05 |
| (1,1402) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:ARG:HB3 | 24 | 0.05 | 0.11 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB2 | 24 | 1.01 | 2.1 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB2 | 24 | 1.01 | 2.1 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB2 | 24 | 1.01 | 2.1 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 23 | 0.16 | 1.05 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 23 | 0.16 | 1.05 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 23 | 0.16 | 1.05 |
| (1,1589) | 1:A:20:ARG:HG3 | 1:A:67:ARG:HE | 23 | 0.83 | 1.88 |
| (1,1523) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:70:GLN:H | 23 | 0.06 | 0.11 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:21:ASP:HA | 22 | 0.06 | 0.12 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:21:ASP:HA | 22 | 0.06 | 0.12 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:21:ASP:HA | 22 | 0.06 | 0.12 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:62:ARG:HG3 | 22 | 0.41 | 1.03 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:62:ARG:HG3 | 22 | 0.41 | 1.03 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:62:ARG:HG3 | 22 | 0.41 | 1.03 |
| (1,171) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:21:ASP:HA | 22 | 0.06 | 0.17 |
| (1,1252) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:63:GLN:HE22 | 22 | 0.03 | 0.04 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB1 | 21 | 0.05 | 0.1 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB2 | 21 | 0.05 | 0.1 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB3 | 21 | 0.05 | 0.1 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB1 | 21 | 0.05 | 0.1 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB2 | 21 | 0.05 | 0.1 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB3 | 21 | 0.05 | 0.1 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB1 | 21 | 0.05 | 0.1 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB2 | 21 | 0.05 | 0.1 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB3 | 21 | 0.05 | 0.1 |
| (1,479) | 1:A:23:ALA:HA | 1:A:21:ASP:HA | 21 | 0.06 | 0.13 |
| (1,1037) | 1:A:36:LEU:HB3 | 1:A:40:MET:HA | 21 | 0.1 | 0.2 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:23:ALA:HA | 20 | 0.11 | 0.2 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:25:ILE:HA | 20 | 0.11 | 0.2 |
| (1,706) | 1:A:59:ARG:HD2 | 1:A:59:ARG:H | 20 | 0.03 | 0.06 |
| (1,706) | 1:A:59:ARG:HD3 | 1:A:59:ARG:H | 20 | 0.03 | 0.06 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:46:GLN:HG2 | 20 | 0.2 | 0.62 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:46:GLN:HG2 | 20 | 0.2 | 0.62 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:46:GLN:HG2 | 20 | 0.2 | 0.62 |
| (1,1407) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:44:VAL:H | 20 | 0.03 | 0.08 |
| (1,778) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:6:GLN:HE21 | 19 | 0.8 | 1.56 |
| (1,662) | 1:A:49:GLU:HA | 1:A:46:GLN:HA | 19 | 0.07 | 0.17 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|--------|----------|---------|
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD11 | 19 | 0.06 | 0.4 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD12 | 19 | 0.06 | 0.4 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD13 | 19 | 0.06 | 0.4 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:66:LEU:HA | 18 | 0.09 | 0.44 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:66:LEU:HA | 18 | 0.09 | 0.44 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:66:LEU:HA | 18 | 0.09 | 0.44 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG21 | 18 | 0.03 | 0.07 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG22 | 18 | 0.03 | 0.07 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG23 | 18 | 0.03 | 0.07 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG21 | 18 | 0.04 | 0.11 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG22 | 18 | 0.04 | 0.11 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG23 | 18 | 0.04 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:45:ARG:HE | 18 | 0.07 | 0.12 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG22 | 1:A:45:ARG:HE | 18 | 0.07 | 0.12 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG23 | 1:A:45:ARG:HE | 18 | 0.07 | 0.12 |
| (1,1248) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:62:ARG:HB3 | 18 | 0.5 | 0.65 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:74:SER:H | 17 | 0.08 | 0.19 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:69:LEU:H | 17 | 0.08 | 0.19 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:26:ASN:H | 17 | 0.05 | 0.11 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:26:ASN:H | 17 | 0.05 | 0.11 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:26:ASN:H | 17 | 0.05 | 0.11 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG11 | 17 | 0.01 | 0.03 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG12 | 17 | 0.01 | 0.03 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG13 | 17 | 0.01 | 0.03 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:H | 17 | 0.12 | 0.41 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:H | 17 | 0.12 | 0.41 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:H | 17 | 0.12 | 0.41 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:9:LEU:HB3 | 16 | 0.05 | 0.1 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG2 | 16 | 0.05 | 0.1 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG3 | 16 | 0.05 | 0.1 |
| (1,704) | 1:A:59:ARG:HB2 | 1:A:59:ARG:H | 16 | 0.11 | 0.15 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:25:ILE:HG13 | 16 | 0.26 | 0.73 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:25:ILE:HG13 | 16 | 0.26 | 0.73 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:25:ILE:HG13 | 16 | 0.26 | 0.73 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:32:ALA:HA | 16 | 0.07 | 0.18 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:32:ALA:HA | 16 | 0.07 | 0.18 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:32:ALA:HA | 16 | 0.07 | 0.18 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:50:ARG:HA | 16 | 0.07 | 0.18 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:50:ARG:HA | 16 | 0.07 | 0.18 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:50:ARG:HA | 16 | 0.07 | 0.18 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 16 | 0.05 | 0.09 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 16 | 0.05 | 0.09 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|--------|----------|---------|
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 16 | 0.05 | 0.09 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD2 | 16 | 0.11 | 1.11 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD3 | 16 | 0.11 | 1.11 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 16 | 0.11 | 1.11 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 16 | 0.11 | 1.11 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD2 | 16 | 0.11 | 1.11 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD3 | 16 | 0.11 | 1.11 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD11 | 15 | 0.37 | 1.05 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD12 | 15 | 0.37 | 1.05 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD13 | 15 | 0.37 | 1.05 |
| (1,732) | 1:A:63:GLN:HG3 | 1:A:60:GLU:HA | 15 | 0.04 | 0.07 |
| (1,1638) | 1:A:57:PRO:HB3 | 1:A:59:ARG:HB2 | 15 | 0.76 | 1.3 |
| (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 15 | 0.27 | 0.51 |
| (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 15 | 0.27 | 0.51 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:29:SER:HA | 15 | 0.73 | 1.32 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:29:SER:HA | 15 | 0.73 | 1.32 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:29:SER:HA | 15 | 0.73 | 1.32 |
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:69:LEU:H | 15 | 0.06 | 0.11 |
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:69:LEU:H | 15 | 0.06 | 0.11 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD21 | 15 | 0.1 | 1.09 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD22 | 15 | 0.1 | 1.09 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD23 | 15 | 0.1 | 1.09 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:51:GLU:HB2 | 15 | 0.73 | 1.99 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:51:GLU:HB2 | 15 | 0.73 | 1.99 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:51:GLU:HB2 | 15 | 0.73 | 1.99 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD21 | 1:A:42:VAL:H | 15 | 0.04 | 0.08 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD22 | 1:A:42:VAL:H | 15 | 0.04 | 0.08 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD23 | 1:A:42:VAL:H | 15 | 0.04 | 0.08 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:31:LEU:HA | 15 | 0.09 | 0.44 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:31:LEU:HA | 15 | 0.09 | 0.44 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:31:LEU:HA | 15 | 0.09 | 0.44 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:40:MET:HA | 14 | 0.06 | 0.1 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:40:MET:HA | 14 | 0.06 | 0.1 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:40:MET:HA | 14 | 0.06 | 0.1 |
| (1,1369) | 1:A:71:GLU:HG2 | 1:A:72:MET:H | 14 | 0.35 | 0.9 |
| (1,1302) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:31:LEU:HB3 | 14 | 0.59 | 1.17 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG21 | 14 | 0.05 | 0.13 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG22 | 14 | 0.05 | 0.13 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG23 | 14 | 0.05 | 0.13 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG21 | 14 | 0.05 | 0.13 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG22 | 14 | 0.05 | 0.13 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG23 | 14 | 0.05 | 0.13 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|--------|----------|---------|
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG21 | 14 | 0.05 | 0.13 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG22 | 14 | 0.05 | 0.13 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG23 | 14 | 0.05 | 0.13 |
| (1,1584) | 1:A:59:ARG:HG3 | 1:A:58:ILE:H | 13 | 0.16 | 0.4 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:26:ASN:HB3 | 13 | 0.99 | 1.72 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:26:ASN:HB3 | 13 | 0.99 | 1.72 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:26:ASN:HB3 | 13 | 0.99 | 1.72 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB1 | 13 | 0.15 | 0.21 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB2 | 13 | 0.15 | 0.21 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB3 | 13 | 0.15 | 0.21 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 12 | 0.05 | 0.16 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 12 | 0.05 | 0.16 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 12 | 0.05 | 0.16 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD11 | 1:A:43:GLU:HG2 | 12 | 0.28 | 0.82 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD12 | 1:A:43:GLU:HG2 | 12 | 0.28 | 0.82 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD13 | 1:A:43:GLU:HG2 | 12 | 0.28 | 0.82 |
| (1,491) | 1:A:27:LEU:HA | 1:A:66:LEU:H | 12 | 0.04 | 0.1 |
| (1,444) | 1:A:47:ILE:HA | 1:A:50:ARG:HB3 | 12 | 1.05 | 1.72 |
| (1,1587) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:75:LYS:HE2 | 12 | 0.03 | 0.07 |
| (1,1587) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:75:LYS:HE3 | 12 | 0.03 | 0.07 |
| (1,1393) | 1:A:44:VAL:HA | 1:A:48:LEU:HG | 12 | 0.03 | 0.07 |
| (1,1308) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:63:GLN:HE21 | 12 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:57:PRO:HB3 | 12 | 0.07 | 0.44 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:57:PRO:HB3 | 12 | 0.07 | 0.44 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:57:PRO:HB3 | 12 | 0.07 | 0.44 |
| (1,1147) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:48:LEU:HB3 | 12 | 0.03 | 0.08 |
| (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:34:LEU:HA | 12 | 0.45 | 0.5 |
| (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:34:LEU:HA | 12 | 0.45 | 0.5 |
| (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:34:LEU:HA | 12 | 0.45 | 0.5 |
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD21 | 11 | 0.05 | 0.09 |
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD22 | 11 | 0.05 | 0.09 |
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD23 | 11 | 0.05 | 0.09 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HG | 11 | 0.54 | 0.86 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HG | 11 | 0.54 | 0.86 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HG | 11 | 0.54 | 0.86 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:47:ILE:HG13 | 11 | 0.08 | 0.65 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:47:ILE:HG13 | 11 | 0.08 | 0.65 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:47:ILE:HG13 | 11 | 0.08 | 0.65 |
| (1,1172) | 1:A:55:VAL:HA | 1:A:57:PRO:HG3 | 11 | 0.03 | 0.05 |
| (1,845) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HB2 | 10 | 0.32 | 0.97 |
| (1,845) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HB3 | 10 | 0.32 | 0.97 |
| (1,1642) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:6:GLN:HE21 | 10 | 0.52 | 1.2 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|--------|----------|---------|
| (1,1642) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:6:GLN:HE21 | 10 | 0.52 | 1.2 |
| (1,1642) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:6:GLN:HE21 | 10 | 0.52 | 1.2 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG21 | 10 | 0.03 | 0.05 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG22 | 10 | 0.03 | 0.05 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG23 | 10 | 0.03 | 0.05 |
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:13:VAL:H | 10 | 0.23 | 1.3 |
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:13:VAL:H | 10 | 0.23 | 1.3 |
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:13:VAL:H | 10 | 0.23 | 1.3 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HB2 | 10 | 0.02 | 0.03 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 10 | 0.02 | 0.03 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:68:LYS:HB2 | 10 | 0.02 | 0.03 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:68:LYS:HB3 | 10 | 0.02 | 0.03 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:29:SER:HB2 | 10 | 0.25 | 0.32 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:29:SER:HB2 | 10 | 0.25 | 0.32 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:29:SER:HB2 | 10 | 0.25 | 0.32 |
| (1,994) | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD21 | 9 | 0.27 | 0.34 |
| (1,994) | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD22 | 9 | 0.27 | 0.34 |
| (1,994) | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD23 | 9 | 0.27 | 0.34 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD11 | 9 | 0.03 | 0.08 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD12 | 9 | 0.03 | 0.08 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD13 | 9 | 0.03 | 0.08 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 9 | 0.03 | 0.08 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 9 | 0.03 | 0.08 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 9 | 0.03 | 0.08 |
| (1,607) | 1:A:67:ARG:HA | 1:A:67:ARG:HD3 | 9 | 0.02 | 0.04 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:74:SER:HB2 | 9 | 0.58 | 0.93 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:74:SER:HB2 | 9 | 0.58 | 0.93 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:74:SER:HB2 | 9 | 0.58 | 0.93 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:31:LEU:HA | 9 | 0.58 | 0.93 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:31:LEU:HA | 9 | 0.58 | 0.93 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:31:LEU:HA | 9 | 0.58 | 0.93 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD11 | 9 | 0.03 | 0.05 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD12 | 9 | 0.03 | 0.05 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD13 | 9 | 0.03 | 0.05 |
| (1,1701) | 1:A:47:ILE:H | 1:A:48:LEU:H | 9 | 0.05 | 0.1 |
| (1,1592) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:30:SER:H | 9 | 0.55 | 0.89 |
| (1,1592) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:30:SER:H | 9 | 0.55 | 0.89 |
| (1,1592) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:30:SER:H | 9 | 0.55 | 0.89 |
| (1,1497) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:63:GLN:HB2 | 9 | 0.05 | 0.14 |
| (1,1497) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:63:GLN:HB2 | 9 | 0.05 | 0.14 |
| (1,1497) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:63:GLN:HB2 | 9 | 0.05 | 0.14 |
| (1,1327) | 1:A:68:LYS:HD2 | 1:A:71:GLU:HB2 | 9 | 0.25 | 0.8 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|--------|----------|---------|
| (1,1327) | 1:A:68:LYS:HD3 | 1:A:71:GLU:HB2 | 9 | 0.25 | 0.8 |
| (1,1239) | 1:A:60:GLU:HB3 | 1:A:56:LEU:HB2 | 9 | 0.15 | 0.67 |
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:52:HIS:HB3 | 9 | 0.02 | 0.05 |
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:52:HIS:HB3 | 9 | 0.02 | 0.05 |
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:52:HIS:HB3 | 9 | 0.02 | 0.05 |
| (1,808) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:30:SER:HA | 8 | 0.02 | 0.03 |
| (1,808) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:30:SER:HA | 8 | 0.02 | 0.03 |
| (1,808) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:30:SER:HA | 8 | 0.02 | 0.03 |
| (1,743) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:72:MET:H | 8 | 0.02 | 0.03 |
| (1,743) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:72:MET:H | 8 | 0.02 | 0.03 |
| (1,740) | 1:A:70:GLN:HA | 1:A:10:VAL:HG21 | 8 | 0.03 | 0.07 |
| (1,740) | 1:A:70:GLN:HA | 1:A:10:VAL:HG22 | 8 | 0.03 | 0.07 |
| (1,740) | 1:A:70:GLN:HA | 1:A:10:VAL:HG23 | 8 | 0.03 | 0.07 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:17:LEU:H | 8 | 0.03 | 0.06 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:17:LEU:H | 8 | 0.03 | 0.06 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:17:LEU:H | 8 | 0.03 | 0.06 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:73:SER:H | 8 | 0.03 | 0.06 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:73:SER:H | 8 | 0.03 | 0.06 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:73:SER:H | 8 | 0.03 | 0.06 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:18:GLY:H | 8 | 0.03 | 0.06 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:18:GLY:H | 8 | 0.03 | 0.06 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:18:GLY:H | 8 | 0.03 | 0.06 |
| (1,306) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:38:SER:H | 8 | 0.03 | 0.05 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HB2 | 8 | 0.22 | 0.47 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HB2 | 8 | 0.22 | 0.47 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HB2 | 8 | 0.22 | 0.47 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD21 | 1:A:36:LEU:HB2 | 8 | 0.22 | 0.47 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD22 | 1:A:36:LEU:HB2 | 8 | 0.22 | 0.47 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD23 | 1:A:36:LEU:HB2 | 8 | 0.22 | 0.47 |
| (1,229) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD21 | 8 | 0.13 | 0.86 |
| (1,229) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD22 | 8 | 0.13 | 0.86 |
| (1,229) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD23 | 8 | 0.13 | 0.86 |
| (1,221) | 1:A:31:LEU:HB2 | 1:A:36:LEU:HB2 | 8 | 0.04 | 0.08 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:9:LEU:HD21 | 8 | 0.67 | 1.52 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:9:LEU:HD22 | 8 | 0.67 | 1.52 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:9:LEU:HD23 | 8 | 0.67 | 1.52 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:48:LEU:HD11 | 8 | 0.67 | 1.52 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:48:LEU:HD12 | 8 | 0.67 | 1.52 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:48:LEU:HD13 | 8 | 0.67 | 1.52 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:9:LEU:HD21 | 8 | 0.04 | 0.09 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:9:LEU:HD22 | 8 | 0.04 | 0.09 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:9:LEU:HD23 | 8 | 0.04 | 0.09 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|--------|----------|---------|
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:9:LEU:HD21 | 8 | 0.04 | 0.09 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:9:LEU:HD22 | 8 | 0.04 | 0.09 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:9:LEU:HD23 | 8 | 0.04 | 0.09 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG2 | 1:A:75:LYS:HE2 | 8 | 0.04 | 0.07 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG2 | 1:A:75:LYS:HE3 | 8 | 0.04 | 0.07 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG3 | 1:A:75:LYS:HE2 | 8 | 0.04 | 0.07 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG3 | 1:A:75:LYS:HE3 | 8 | 0.04 | 0.07 |
| (1,1552) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:24:GLY:H | 8 | 0.06 | 0.09 |
| (1,1552) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:24:GLY:H | 8 | 0.06 | 0.09 |
| (1,1552) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:24:GLY:H | 8 | 0.06 | 0.09 |
| (1,1423) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:39:LEU:HG | 8 | 0.02 | 0.04 |
| (1,1423) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:39:LEU:HG | 8 | 0.02 | 0.04 |
| (1,1423) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:39:LEU:HG | 8 | 0.02 | 0.04 |
| (1,1303) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:31:LEU:HB3 | 8 | 0.27 | 0.56 |
| (1,1263) | 1:A:61:VAL:HG11 | 1:A:62:ARG:HB3 | 8 | 0.17 | 0.3 |
| (1,1263) | 1:A:61:VAL:HG12 | 1:A:62:ARG:HB3 | 8 | 0.17 | 0.3 |
| (1,1263) | 1:A:61:VAL:HG13 | 1:A:62:ARG:HB3 | 8 | 0.17 | 0.3 |
| (1,1061) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:38:SER:H | 8 | 0.06 | 0.15 |
| (1,1061) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:38:SER:H | 8 | 0.06 | 0.15 |
| (1,1061) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:38:SER:H | 8 | 0.06 | 0.15 |
| (1,58) | 1:A:66:LEU:HD21 | 1:A:10:VAL:HB | 7 | 0.02 | 0.04 |
| (1,58) | 1:A:66:LEU:HD22 | 1:A:10:VAL:HB | 7 | 0.02 | 0.04 |
| (1,58) | 1:A:66:LEU:HD23 | 1:A:10:VAL:HB | 7 | 0.02 | 0.04 |
| (1,58) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:43:GLU:HB2 | 7 | 0.02 | 0.04 |
| (1,58) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:43:GLU:HB2 | 7 | 0.02 | 0.04 |
| (1,58) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:43:GLU:HB2 | 7 | 0.02 | 0.04 |
| (1,502) | 1:A:19:ILE:HD11 | 1:A:25:ILE:HG13 | 7 | 0.37 | 1.0 |
| (1,502) | 1:A:19:ILE:HD12 | 1:A:25:ILE:HG13 | 7 | 0.37 | 1.0 |
| (1,502) | 1:A:19:ILE:HD13 | 1:A:25:ILE:HG13 | 7 | 0.37 | 1.0 |
| (1,316) | 1:A:40:MET:HB2 | 1:A:39:LEU:HD21 | 7 | 0.26 | 0.63 |
| (1,316) | 1:A:40:MET:HB2 | 1:A:39:LEU:HD22 | 7 | 0.26 | 0.63 |
| (1,316) | 1:A:40:MET:HB2 | 1:A:39:LEU:HD23 | 7 | 0.26 | 0.63 |
| (1,240) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:34:LEU:HB2 | 7 | 0.52 | 0.63 |
| (1,240) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:34:LEU:HB2 | 7 | 0.52 | 0.63 |
| (1,240) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:34:LEU:HB2 | 7 | 0.52 | 0.63 |
| (1,233) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:31:LEU:HA | 7 | 0.75 | 0.8 |
| (1,233) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:31:LEU:HA | 7 | 0.75 | 0.8 |
| (1,233) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:31:LEU:HA | 7 | 0.75 | 0.8 |
| (1,1411) | 1:A:42:VAL:HG11 | 1:A:43:GLU:HG3 | 7 | 0.03 | 0.06 |
| (1,1411) | 1:A:42:VAL:HG12 | 1:A:43:GLU:HG3 | 7 | 0.03 | 0.06 |
| (1,1411) | 1:A:42:VAL:HG13 | 1:A:43:GLU:HG3 | 7 | 0.03 | 0.06 |
| (1,1311) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:68:LYS:HD2 | 7 | 0.02 | 0.03 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|--------|----------|---------|
| (1,1311) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:68:LYS:HD3 | 7 | 0.02 | 0.03 |
| (1,971) | 1:A:27:LEU:HD11 | 1:A:25:ILE:H | 6 | 0.04 | 0.05 |
| (1,971) | 1:A:27:LEU:HD12 | 1:A:25:ILE:H | 6 | 0.04 | 0.05 |
| (1,971) | 1:A:27:LEU:HD13 | 1:A:25:ILE:H | 6 | 0.04 | 0.05 |
| (1,779) | 1:A:52:HIS:HB2 | 1:A:6:GLN:HE21 | 6 | 0.67 | 1.18 |
| (1,719) | 1:A:63:GLN:HB2 | 1:A:63:GLN:HE21 | 6 | 0.81 | 0.85 |
| (1,700) | 1:A:59:ARG:HA | 1:A:62:ARG:HD2 | 6 | 0.43 | 0.86 |
| (1,70) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:72:MET:H | 6 | 0.02 | 0.04 |
| (1,70) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:72:MET:H | 6 | 0.02 | 0.04 |
| (1,70) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:72:MET:H | 6 | 0.02 | 0.04 |
| (1,70) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:71:GLU:H | 6 | 0.02 | 0.04 |
| (1,70) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:71:GLU:H | 6 | 0.02 | 0.04 |
| (1,70) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:71:GLU:H | 6 | 0.02 | 0.04 |
| (1,549) | 1:A:72:MET:HB2 | 1:A:72:MET:H | 6 | 0.18 | 0.27 |
| (1,456) | 1:A:47:ILE:HB | 1:A:50:ARG:H | 6 | 0.03 | 0.04 |
| (1,194) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HG | 6 | 0.02 | 0.03 |
| (1,192) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD21 | 6 | 0.11 | 0.2 |
| (1,192) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD22 | 6 | 0.11 | 0.2 |
| (1,192) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD23 | 6 | 0.11 | 0.2 |
| (1,1726) | 1:A:80:THR:H | 1:A:81:GLU:H | 6 | 0.04 | 0.07 |
| (1,1555) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB3 | 6 | 0.72 | 1.64 |
| (1,1555) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB3 | 6 | 0.72 | 1.64 |
| (1,1555) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB3 | 6 | 0.72 | 1.64 |
| (1,1531) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:72:MET:H | 6 | 0.03 | 0.04 |
| (1,1531) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:72:MET:H | 6 | 0.03 | 0.04 |
| (1,1531) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:72:MET:H | 6 | 0.03 | 0.04 |
| (1,1493) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:50:ARG:HD2 | 6 | 0.03 | 0.05 |
| (1,1493) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:50:ARG:HD3 | 6 | 0.03 | 0.05 |
| (1,1447) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:17:LEU:HG | 6 | 0.02 | 0.05 |
| (1,1447) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:17:LEU:HG | 6 | 0.02 | 0.05 |
| (1,1447) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:17:LEU:HG | 6 | 0.02 | 0.05 |
| (1,1435) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:9:LEU:HA | 6 | 0.03 | 0.06 |
| (1,1435) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:9:LEU:HA | 6 | 0.03 | 0.06 |
| (1,1435) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:9:LEU:HA | 6 | 0.03 | 0.06 |
| (1,111) | 1:A:55:VAL:HG21 | 1:A:49:GLU:HG3 | 6 | 0.45 | 0.95 |
| (1,111) | 1:A:55:VAL:HG22 | 1:A:49:GLU:HG3 | 6 | 0.45 | 0.95 |
| (1,111) | 1:A:55:VAL:HG23 | 1:A:49:GLU:HG3 | 6 | 0.45 | 0.95 |
| (1,1108) | 1:A:48:LEU:HA | 1:A:52:HIS:HB3 | 6 | 0.02 | 0.03 |
| (1,1071) | 1:A:36:LEU:HG | 1:A:38:SER:H | 6 | 0.06 | 0.18 |
| (1,968) | 1:A:27:LEU:HD11 | 1:A:67:ARG:HA | 5 | 0.02 | 0.03 |
| (1,968) | 1:A:27:LEU:HD12 | 1:A:67:ARG:HA | 5 | 0.02 | 0.03 |
| (1,968) | 1:A:27:LEU:HD13 | 1:A:67:ARG:HA | 5 | 0.02 | 0.03 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|--------|----------|---------|
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:43:GLU:H | 5 | 0.08 | 0.13 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG22 | 1:A:43:GLU:H | 5 | 0.08 | 0.13 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG23 | 1:A:43:GLU:H | 5 | 0.08 | 0.13 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:42:VAL:H | 5 | 0.08 | 0.13 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG22 | 1:A:42:VAL:H | 5 | 0.08 | 0.13 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG23 | 1:A:42:VAL:H | 5 | 0.08 | 0.13 |
| (1,9) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:50:ARG:HE | 5 | 0.08 | 0.13 |
| (1,9) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:50:ARG:HE | 5 | 0.08 | 0.13 |
| (1,9) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:50:ARG:HE | 5 | 0.08 | 0.13 |
| (1,896) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:6:GLN:HE21 | 5 | 0.15 | 0.39 |
| (1,896) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:6:GLN:HE21 | 5 | 0.15 | 0.39 |
| (1,896) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:6:GLN:HE21 | 5 | 0.15 | 0.39 |
| (1,847) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HD2 | 5 | 0.12 | 0.43 |
| (1,847) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HD3 | 5 | 0.12 | 0.43 |
| (1,846) | 1:A:8:ASP:HB3 | 1:A:11:LYS:HD2 | 5 | 0.03 | 0.06 |
| (1,846) | 1:A:8:ASP:HB3 | 1:A:11:LYS:HD3 | 5 | 0.03 | 0.06 |
| (1,798) | 1:A:51:GLU:HG2 | 1:A:50:ARG:HG2 | 5 | 0.34 | 0.56 |
| (1,798) | 1:A:51:GLU:HG3 | 1:A:50:ARG:HG2 | 5 | 0.34 | 0.56 |
| (1,787) | 1:A:51:GLU:HB3 | 1:A:6:GLN:HE21 | 5 | 0.27 | 0.4 |
| (1,668) | 1:A:49:GLU:HG2 | 1:A:46:GLN:HA | 5 | 0.3 | 0.7 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:11:LYS:HE2 | 5 | 0.04 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:11:LYS:HE3 | 5 | 0.04 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:11:LYS:HE2 | 5 | 0.04 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:11:LYS:HE3 | 5 | 0.04 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:11:LYS:HE2 | 5 | 0.04 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:11:LYS:HE3 | 5 | 0.04 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:68:LYS:HE2 | 5 | 0.04 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:68:LYS:HE3 | 5 | 0.04 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:68:LYS:HE2 | 5 | 0.04 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:68:LYS:HE3 | 5 | 0.04 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:68:LYS:HE2 | 5 | 0.04 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:68:LYS:HE3 | 5 | 0.04 | 0.04 |
| (1,417) | 1:A:45:ARG:HD2 | 1:A:61:VAL:HG11 | 5 | 0.02 | 0.03 |
| (1,417) | 1:A:45:ARG:HD2 | 1:A:61:VAL:HG12 | 5 | 0.02 | 0.03 |
| (1,417) | 1:A:45:ARG:HD2 | 1:A:61:VAL:HG13 | 5 | 0.02 | 0.03 |
| (1,417) | 1:A:45:ARG:HD3 | 1:A:61:VAL:HG11 | 5 | 0.02 | 0.03 |
| (1,417) | 1:A:45:ARG:HD3 | 1:A:61:VAL:HG12 | 5 | 0.02 | 0.03 |
| (1,417) | 1:A:45:ARG:HD3 | 1:A:61:VAL:HG13 | 5 | 0.02 | 0.03 |
| (1,360) | 1:A:17:LEU:HA | 1:A:19:ILE:HG21 | 5 | 0.02 | 0.03 |
| (1,360) | 1:A:17:LEU:HA | 1:A:19:ILE:HG22 | 5 | 0.02 | 0.03 |
| (1,360) | 1:A:17:LEU:HA | 1:A:19:ILE:HG23 | 5 | 0.02 | 0.03 |
| (1,1692) | 1:A:33:ASP:H | 1:A:36:LEU:H | 5 | 0.03 | 0.05 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|--------|----------|---------|
| (1,1509) | 1:A:72:MET:HG2 | 1:A:9:LEU:HD11 | 5 | 0.36 | 1.02 |
| (1,1509) | 1:A:72:MET:HG2 | 1:A:9:LEU:HD12 | 5 | 0.36 | 1.02 |
| (1,1509) | 1:A:72:MET:HG2 | 1:A:9:LEU:HD13 | 5 | 0.36 | 1.02 |
| (1,1503) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:49:GLU:H | 5 | 0.02 | 0.04 |
| (1,1503) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:49:GLU:H | 5 | 0.02 | 0.04 |
| (1,1503) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:49:GLU:H | 5 | 0.02 | 0.04 |
| (1,1267) | 1:A:61:VAL:HG21 | 1:A:60:GLU:HB3 | 5 | 0.02 | 0.03 |
| (1,1267) | 1:A:61:VAL:HG22 | 1:A:60:GLU:HB3 | 5 | 0.02 | 0.03 |
| (1,1267) | 1:A:61:VAL:HG23 | 1:A:60:GLU:HB3 | 5 | 0.02 | 0.03 |
| (1,1091) | 1:A:39:LEU:HD11 | 1:A:39:LEU:HA | 5 | 0.12 | 0.26 |
| (1,1091) | 1:A:39:LEU:HD12 | 1:A:39:LEU:HA | 5 | 0.12 | 0.26 |
| (1,1091) | 1:A:39:LEU:HD13 | 1:A:39:LEU:HA | 5 | 0.12 | 0.26 |
| (1,1016) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:29:SER:H | 5 | 0.04 | 0.06 |
| (1,1016) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:29:SER:H | 5 | 0.04 | 0.06 |
| (1,1016) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:29:SER:H | 5 | 0.04 | 0.06 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:9:LEU:HD11 | 4 | 0.02 | 0.03 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:9:LEU:HD12 | 4 | 0.02 | 0.03 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:9:LEU:HD13 | 4 | 0.02 | 0.03 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:9:LEU:HD11 | 4 | 0.02 | 0.03 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:9:LEU:HD12 | 4 | 0.02 | 0.03 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:9:LEU:HD13 | 4 | 0.02 | 0.03 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:9:LEU:HD11 | 4 | 0.02 | 0.03 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:9:LEU:HD12 | 4 | 0.02 | 0.03 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:9:LEU:HD13 | 4 | 0.02 | 0.03 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:68:LYS:HB2 | 4 | 0.02 | 0.03 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:68:LYS:HB3 | 4 | 0.02 | 0.03 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:68:LYS:HB2 | 4 | 0.02 | 0.03 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:68:LYS:HB3 | 4 | 0.02 | 0.03 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:68:LYS:HB2 | 4 | 0.02 | 0.03 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:68:LYS:HB3 | 4 | 0.02 | 0.03 |
| (1,844) | 1:A:8:ASP:HB3 | 1:A:11:LYS:HB2 | 4 | 0.12 | 0.21 |
| (1,844) | 1:A:8:ASP:HB3 | 1:A:11:LYS:HB3 | 4 | 0.12 | 0.21 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD11 | 4 | 0.08 | 0.14 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD12 | 4 | 0.08 | 0.14 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD13 | 4 | 0.08 | 0.14 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD21 | 4 | 0.08 | 0.14 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD22 | 4 | 0.08 | 0.14 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD23 | 4 | 0.08 | 0.14 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 4 | 0.08 | 0.14 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 4 | 0.08 | 0.14 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 4 | 0.08 | 0.14 |
| (1,72) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:6:GLN:HE21 | 4 | 0.42 | 1.04 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|--------|----------|---------|
| (1,72) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:6:GLN:HE21 | 4 | 0.42 | 1.04 |
| (1,72) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:6:GLN:HE21 | 4 | 0.42 | 1.04 |
| (1,72) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:6:GLN:HE21 | 4 | 0.42 | 1.04 |
| (1,72) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:6:GLN:HE21 | 4 | 0.42 | 1.04 |
| (1,72) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:6:GLN:HE21 | 4 | 0.42 | 1.04 |
| (1,715) | 1:A:63:GLN:HB3 | 1:A:60:GLU:HA | 4 | 0.04 | 0.05 |
| (1,531) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:22:LEU:HA | 4 | 0.01 | 0.01 |
| (1,531) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:22:LEU:HA | 4 | 0.01 | 0.01 |
| (1,531) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:22:LEU:HA | 4 | 0.01 | 0.01 |
| (1,412) | 1:A:45:ARG:HD2 | 1:A:58:ILE:HA | 4 | 0.71 | 0.76 |
| (1,412) | 1:A:45:ARG:HD3 | 1:A:58:ILE:HA | 4 | 0.71 | 0.76 |
| (1,1574) | 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:40:MET:HG2 | 4 | 0.02 | 0.03 |
| (1,1574) | 1:A:16:ILE:HG22 | 1:A:40:MET:HG2 | 4 | 0.02 | 0.03 |
| (1,1574) | 1:A:16:ILE:HG23 | 1:A:40:MET:HG2 | 4 | 0.02 | 0.03 |
| (1,1548) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:21:ASP:HB2 | 4 | 0.26 | 0.39 |
| (1,1548) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:21:ASP:HB2 | 4 | 0.26 | 0.39 |
| (1,1548) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:21:ASP:HB2 | 4 | 0.26 | 0.39 |
| (1,1517) | 1:A:8:ASP:HB3 | 1:A:7:ARG:HA | 4 | 0.02 | 0.04 |
| (1,1494) | 1:A:46:GLN:HG2 | 1:A:50:ARG:HD2 | 4 | 0.05 | 0.09 |
| (1,1494) | 1:A:46:GLN:HG2 | 1:A:50:ARG:HD3 | 4 | 0.05 | 0.09 |
| (1,1429) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:39:LEU:H | 4 | 0.04 | 0.07 |
| (1,1429) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:39:LEU:H | 4 | 0.04 | 0.07 |
| (1,1429) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:39:LEU:H | 4 | 0.04 | 0.07 |
| (1,1222) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:63:GLN:HE22 | 4 | 0.03 | 0.08 |
| (1,1222) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:63:GLN:HE22 | 4 | 0.03 | 0.08 |
| (1,1222) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:63:GLN:HE22 | 4 | 0.03 | 0.08 |
| (1,1158) | 1:A:54:LEU:HB3 | 1:A:48:LEU:HB3 | 4 | 0.03 | 0.05 |
| (1,1099) | 1:A:40:MET:HG3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 4 | 0.67 | 1.07 |
| (1,1099) | 1:A:40:MET:HG3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 4 | 0.67 | 1.07 |
| (1,1099) | 1:A:40:MET:HG3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 4 | 0.67 | 1.07 |
| (1,1056) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:62:ARG:HA | 4 | 0.02 | 0.04 |
| (1,1056) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:62:ARG:HA | 4 | 0.02 | 0.04 |
| (1,1056) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:62:ARG:HA | 4 | 0.02 | 0.04 |
| (1,1009) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:29:SER:HB2 | 4 | 0.02 | 0.06 |
| (1,1009) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:29:SER:HB2 | 4 | 0.02 | 0.06 |
| (1,1009) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:29:SER:HB2 | 4 | 0.02 | 0.06 |
| (1,996) | 1:A:33:ASP:HB2 | 1:A:29:SER:HB2 | 3 | 0.02 | 0.04 |
| (1,97) | 1:A:52:HIS:HB2 | 1:A:54:LEU:HB3 | 3 | 0.03 | 0.04 |
| (1,900) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:48:LEU:HD11 | 3 | 1.59 | 1.74 |
| (1,900) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:48:LEU:HD12 | 3 | 1.59 | 1.74 |
| (1,900) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:48:LEU:HD13 | 3 | 1.59 | 1.74 |
| (1,900) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:48:LEU:HD11 | 3 | 1.59 | 1.74 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|--------|----------|---------|
| (1,900) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:48:LEU:HD12 | 3 | 1.59 | 1.74 |
| (1,900) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:48:LEU:HD13 | 3 | 1.59 | 1.74 |
| (1,900) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:48:LEU:HD11 | 3 | 1.59 | 1.74 |
| (1,900) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:48:LEU:HD12 | 3 | 1.59 | 1.74 |
| (1,900) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:48:LEU:HD13 | 3 | 1.59 | 1.74 |
| (1,880) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:10:VAL:H | 3 | 0.02 | 0.03 |
| (1,880) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:10:VAL:H | 3 | 0.02 | 0.03 |
| (1,880) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:10:VAL:H | 3 | 0.02 | 0.03 |
| (1,785) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HB3 | 3 | 0.02 | 0.02 |
| (1,711) | 1:A:63:GLN:HA | 1:A:30:SER:HB2 | 3 | 0.02 | 0.05 |
| (1,710) | 1:A:63:GLN:HA | 1:A:30:SER:HB3 | 3 | 0.02 | 0.03 |
| (1,59) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:64:LEU:HB2 | 3 | 0.02 | 0.04 |
| (1,59) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:64:LEU:HB2 | 3 | 0.02 | 0.04 |
| (1,59) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:64:LEU:HB2 | 3 | 0.02 | 0.04 |
| (1,59) | 1:A:66:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HB2 | 3 | 0.02 | 0.04 |
| (1,59) | 1:A:66:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HB2 | 3 | 0.02 | 0.04 |
| (1,59) | 1:A:66:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HB2 | 3 | 0.02 | 0.04 |
| (1,54) | 1:A:20:ARG:HG3 | 1:A:67:ARG:HD3 | 3 | 0.22 | 0.31 |
| (1,54) | 1:A:20:ARG:HG3 | 1:A:10:VAL:HA | 3 | 0.22 | 0.31 |
| (1,54) | 1:A:7:ARG:HG2 | 1:A:10:VAL:HA | 3 | 0.22 | 0.31 |
| (1,54) | 1:A:7:ARG:HG3 | 1:A:10:VAL:HA | 3 | 0.22 | 0.31 |
| (1,469) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:16:ILE:H | 3 | 0.15 | 0.3 |
| (1,469) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:16:ILE:H | 3 | 0.15 | 0.3 |
| (1,469) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:16:ILE:H | 3 | 0.15 | 0.3 |
| (1,468) | 1:A:47:ILE:HA | 1:A:48:LEU:HD11 | 3 | 0.47 | 0.61 |
| (1,468) | 1:A:47:ILE:HA | 1:A:48:LEU:HD12 | 3 | 0.47 | 0.61 |
| (1,468) | 1:A:47:ILE:HA | 1:A:48:LEU:HD13 | 3 | 0.47 | 0.61 |
| (1,297) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:16:ILE:HA | 3 | 0.03 | 0.04 |
| (1,297) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:16:ILE:HA | 3 | 0.03 | 0.04 |
| (1,297) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:16:ILE:HA | 3 | 0.03 | 0.04 |
| (1,297) | 1:A:17:LEU:HD21 | 1:A:16:ILE:HA | 3 | 0.03 | 0.04 |
| (1,297) | 1:A:17:LEU:HD22 | 1:A:16:ILE:HA | 3 | 0.03 | 0.04 |
| (1,297) | 1:A:17:LEU:HD23 | 1:A:16:ILE:HA | 3 | 0.03 | 0.04 |
| (1,236) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:66:LEU:H | 3 | 0.44 | 0.97 |
| (1,236) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:66:LEU:H | 3 | 0.44 | 0.97 |
| (1,236) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:66:LEU:H | 3 | 0.44 | 0.97 |
| (1,1698) | 1:A:38:SER:H | 1:A:39:LEU:H | 3 | 0.19 | 0.24 |
| (1,1646) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:9:LEU:H | 3 | 0.05 | 0.11 |
| (1,1624) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:57:PRO:HD2 | 3 | 0.01 | 0.02 |
| (1,1624) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:57:PRO:HD2 | 3 | 0.01 | 0.02 |
| (1,1624) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:57:PRO:HD2 | 3 | 0.01 | 0.02 |
| (1,1588) | 1:A:7:ARG:HG2 | 1:A:12:ALA:H | 3 | 0.03 | 0.04 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|--------|----------|---------|
| (1,1588) | 1:A:7:ARG:HG3 | 1:A:12:ALA:H | 3 | 0.03 | 0.04 |
| (1,1551) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:17:LEU:H | 3 | 0.03 | 0.05 |
| (1,1551) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:17:LEU:H | 3 | 0.03 | 0.05 |
| (1,1551) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:17:LEU:H | 3 | 0.03 | 0.05 |
| (1,1376) | 1:A:12:ALA:HB1 | 1:A:7:ARG:HD2 | 3 | 0.08 | 0.14 |
| (1,1376) | 1:A:12:ALA:HB1 | 1:A:7:ARG:HD3 | 3 | 0.08 | 0.14 |
| (1,1376) | 1:A:12:ALA:HB2 | 1:A:7:ARG:HD2 | 3 | 0.08 | 0.14 |
| (1,1376) | 1:A:12:ALA:HB2 | 1:A:7:ARG:HD3 | 3 | 0.08 | 0.14 |
| (1,1376) | 1:A:12:ALA:HB3 | 1:A:7:ARG:HD2 | 3 | 0.08 | 0.14 |
| (1,1376) | 1:A:12:ALA:HB3 | 1:A:7:ARG:HD3 | 3 | 0.08 | 0.14 |
| (1,1314) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:68:LYS:HD2 | 3 | 0.07 | 0.16 |
| (1,1314) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:68:LYS:HD3 | 3 | 0.07 | 0.16 |
| (1,1314) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:68:LYS:HD2 | 3 | 0.07 | 0.16 |
| (1,1314) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:68:LYS:HD3 | 3 | 0.07 | 0.16 |
| (1,1314) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:68:LYS:HD2 | 3 | 0.07 | 0.16 |
| (1,1314) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:68:LYS:HD3 | 3 | 0.07 | 0.16 |
| (1,1296) | 1:A:63:GLN:HA | 1:A:32:ALA:HB1 | 3 | 0.04 | 0.05 |
| (1,1296) | 1:A:63:GLN:HA | 1:A:32:ALA:HB2 | 3 | 0.04 | 0.05 |
| (1,1296) | 1:A:63:GLN:HA | 1:A:32:ALA:HB3 | 3 | 0.04 | 0.05 |
| (1,1220) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:ARG:HD2 | 3 | 0.13 | 0.31 |
| (1,1220) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:ARG:HD2 | 3 | 0.13 | 0.31 |
| (1,1220) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:ARG:HD2 | 3 | 0.13 | 0.31 |
| (1,1219) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:59:ARG:HD2 | 3 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1219) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:59:ARG:HD3 | 3 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1219) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:59:ARG:HD2 | 3 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1219) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:59:ARG:HD3 | 3 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1219) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:59:ARG:HD2 | 3 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1219) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:59:ARG:HD3 | 3 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1126) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:52:HIS:H | 3 | 0.58 | 0.87 |
| (1,1126) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:52:HIS:H | 3 | 0.58 | 0.87 |
| (1,1126) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:52:HIS:H | 3 | 0.58 | 0.87 |
| (1,1123) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:52:HIS:HB2 | 3 | 1.63 | 3.01 |
| (1,1123) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:52:HIS:HB2 | 3 | 1.63 | 3.01 |
| (1,1123) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:52:HIS:HB2 | 3 | 1.63 | 3.01 |
| (1,1122) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:52:HIS:HB3 | 3 | 1.18 | 1.67 |
| (1,1122) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:52:HIS:HB3 | 3 | 1.18 | 1.67 |
| (1,1122) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:52:HIS:HB3 | 3 | 1.18 | 1.67 |
| (1,1117) | 1:A:48:LEU:HA | 1:A:48:LEU:HD11 | 3 | 0.83 | 0.84 |
| (1,1117) | 1:A:48:LEU:HA | 1:A:48:LEU:HD12 | 3 | 0.83 | 0.84 |
| (1,1117) | 1:A:48:LEU:HA | 1:A:48:LEU:HD13 | 3 | 0.83 | 0.84 |
| (1,1107) | 1:A:48:LEU:HA | 1:A:52:HIS:HB2 | 3 | 0.48 | 0.9 |
| (1,1012) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:31:LEU:H | 3 | 0.54 | 0.84 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|--------|----------|---------|
| (1,1012) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:31:LEU:H | 3 | 0.54 | 0.84 |
| (1,1012) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:31:LEU:H | 3 | 0.54 | 0.84 |
| (1,1005) | 1:A:33:ASP:HB3 | 1:A:30:SER:H | 3 | 0.02 | 0.03 |
| (1,939) | 1:A:57:PRO:HD2 | 1:A:60:GLU:HG2 | 2 | 0.03 | 0.04 |
| (1,939) | 1:A:57:PRO:HD2 | 1:A:60:GLU:HG3 | 2 | 0.03 | 0.04 |
| (1,933) | 1:A:57:PRO:HG3 | 1:A:60:GLU:H | 2 | 0.03 | 0.06 |
| (1,931) | 1:A:57:PRO:HG3 | 1:A:60:GLU:HG2 | 2 | 0.01 | 0.02 |
| (1,931) | 1:A:57:PRO:HG3 | 1:A:60:GLU:HG3 | 2 | 0.01 | 0.02 |
| (1,928) | 1:A:57:PRO:HG2 | 1:A:56:LEU:HD21 | 2 | 0.96 | 0.98 |
| (1,928) | 1:A:57:PRO:HG2 | 1:A:56:LEU:HD22 | 2 | 0.96 | 0.98 |
| (1,928) | 1:A:57:PRO:HG2 | 1:A:56:LEU:HD23 | 2 | 0.96 | 0.98 |
| (1,927) | 1:A:57:PRO:HG3 | 1:A:56:LEU:HD21 | 2 | 0.49 | 0.79 |
| (1,927) | 1:A:57:PRO:HG3 | 1:A:56:LEU:HD22 | 2 | 0.49 | 0.79 |
| (1,927) | 1:A:57:PRO:HG3 | 1:A:56:LEU:HD23 | 2 | 0.49 | 0.79 |
| (1,874) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:70:GLN:HG3 | 2 | 0.07 | 0.08 |
| (1,874) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:70:GLN:HG3 | 2 | 0.07 | 0.08 |
| (1,874) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:70:GLN:HG3 | 2 | 0.07 | 0.08 |
| (1,851) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 2 | 0.16 | 0.17 |
| (1,851) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 2 | 0.16 | 0.17 |
| (1,851) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 2 | 0.16 | 0.17 |
| (1,811) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:28:ASP:HA | 2 | 0.05 | 0.05 |
| (1,811) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:28:ASP:HA | 2 | 0.05 | 0.05 |
| (1,811) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:28:ASP:HA | 2 | 0.05 | 0.05 |
| (1,806) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:67:ARG:HB2 | 2 | 0.08 | 0.11 |
| (1,806) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:67:ARG:HB3 | 2 | 0.08 | 0.11 |
| (1,806) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:67:ARG:HB2 | 2 | 0.08 | 0.11 |
| (1,806) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:67:ARG:HB3 | 2 | 0.08 | 0.11 |
| (1,806) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:67:ARG:HB2 | 2 | 0.08 | 0.11 |
| (1,806) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:67:ARG:HB3 | 2 | 0.08 | 0.11 |
| (1,769) | 1:A:82:LEU:HA | 1:A:82:LEU:HD11 | 2 | 0.07 | 0.07 |
| (1,769) | 1:A:82:LEU:HA | 1:A:82:LEU:HD12 | 2 | 0.07 | 0.07 |
| (1,769) | 1:A:82:LEU:HA | 1:A:82:LEU:HD13 | 2 | 0.07 | 0.07 |
| (1,755) | 1:A:70:GLN:HG2 | 1:A:10:VAL:HG21 | 2 | 0.03 | 0.04 |
| (1,755) | 1:A:70:GLN:HG2 | 1:A:10:VAL:HG22 | 2 | 0.03 | 0.04 |
| (1,755) | 1:A:70:GLN:HG2 | 1:A:10:VAL:HG23 | 2 | 0.03 | 0.04 |
| (1,691) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:47:ILE:HD11 | 2 | 0.03 | 0.04 |
| (1,691) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:47:ILE:HD12 | 2 | 0.03 | 0.04 |
| (1,691) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:47:ILE:HD13 | 2 | 0.03 | 0.04 |
| (1,684) | 1:A:43:GLU:HG3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 2 | 0.04 | 0.05 |
| (1,684) | 1:A:43:GLU:HG3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 2 | 0.04 | 0.05 |
| (1,684) | 1:A:43:GLU:HG3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 2 | 0.04 | 0.05 |
| (1,664) | 1:A:49:GLU:HG2 | 1:A:55:VAL:HG21 | 2 | 0.22 | 0.24 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|--------|----------|---------|
| (1,664) | 1:A:49:GLU:HG2 | 1:A:55:VAL:HG22 | 2 | 0.22 | 0.24 |
| (1,664) | 1:A:49:GLU:HG2 | 1:A:55:VAL:HG23 | 2 | 0.22 | 0.24 |
| (1,638) | 1:A:50:ARG:HD2 | 1:A:50:ARG:HA | 2 | 0.01 | 0.02 |
| (1,638) | 1:A:50:ARG:HD3 | 1:A:50:ARG:HA | 2 | 0.01 | 0.02 |
| (1,599) | 1:A:66:LEU:HA | 1:A:69:LEU:H | 2 | 0.03 | 0.03 |
| (1,405) | 1:A:41:GLY:HA3 | 1:A:44:VAL:HG11 | 2 | 0.01 | 0.01 |
| (1,405) | 1:A:41:GLY:HA3 | 1:A:44:VAL:HG12 | 2 | 0.01 | 0.01 |
| (1,405) | 1:A:41:GLY:HA3 | 1:A:44:VAL:HG13 | 2 | 0.01 | 0.01 |
| (1,366) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:16:ILE:HG21 | 2 | 0.03 | 0.03 |
| (1,366) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:16:ILE:HG22 | 2 | 0.03 | 0.03 |
| (1,366) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:16:ILE:HG23 | 2 | 0.03 | 0.03 |
| (1,32) | 1:A:27:LEU:HD11 | 1:A:70:GLN:HE21 | 2 | 0.2 | 0.38 |
| (1,32) | 1:A:27:LEU:HD12 | 1:A:70:GLN:HE21 | 2 | 0.2 | 0.38 |
| (1,32) | 1:A:27:LEU:HD13 | 1:A:70:GLN:HE21 | 2 | 0.2 | 0.38 |
| (1,32) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:70:GLN:HE21 | 2 | 0.2 | 0.38 |
| (1,32) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:70:GLN:HE21 | 2 | 0.2 | 0.38 |
| (1,32) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:70:GLN:HE21 | 2 | 0.2 | 0.38 |
| (1,319) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:48:LEU:H | 2 | 0.01 | 0.02 |
| (1,296) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:19:ILE:HG13 | 2 | 0.5 | 0.58 |
| (1,296) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:19:ILE:HG13 | 2 | 0.5 | 0.58 |
| (1,296) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:19:ILE:HG13 | 2 | 0.5 | 0.58 |
| (1,291) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:17:LEU:H | 2 | 0.12 | 0.13 |
| (1,193) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD11 | 2 | 0.01 | 0.02 |
| (1,193) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD12 | 2 | 0.01 | 0.02 |
| (1,193) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD13 | 2 | 0.01 | 0.02 |
| (1,1731) | 1:A:4:GLU:H | 1:A:3:GLY:H | 2 | 0.03 | 0.03 |
| (1,1727) | 1:A:86:LYS:H | 1:A:85:PRO:HA | 2 | 0.14 | 0.15 |
| (1,1725) | 1:A:80:THR:H | 1:A:79:ASP:H | 2 | 0.01 | 0.02 |
| (1,1648) | 1:A:74:SER:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 2 | 0.48 | 0.94 |
| (1,1648) | 1:A:74:SER:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 2 | 0.48 | 0.94 |
| (1,1648) | 1:A:74:SER:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 2 | 0.48 | 0.94 |
| (1,1628) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:9:LEU:HD11 | 2 | 0.04 | 0.05 |
| (1,1628) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:9:LEU:HD12 | 2 | 0.04 | 0.05 |
| (1,1628) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:9:LEU:HD13 | 2 | 0.04 | 0.05 |
| (1,1599) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:40:MET:HG2 | 2 | 0.04 | 0.05 |
| (1,1599) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:40:MET:HG2 | 2 | 0.04 | 0.05 |
| (1,1599) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:40:MET:HG2 | 2 | 0.04 | 0.05 |
| (1,1597) | 1:A:27:LEU:HB2 | 1:A:27:LEU:H | 2 | 0.05 | 0.08 |
| (1,1578) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:22:LEU:HA | 2 | 0.03 | 0.03 |
| (1,1578) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:22:LEU:HA | 2 | 0.03 | 0.03 |
| (1,1578) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:22:LEU:HA | 2 | 0.03 | 0.03 |
| (1,1569) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:70:GLN:HB2 | 2 | 0.14 | 0.15 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|--------|----------|---------|
| (1,1569) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:70:GLN:HB3 | 2 | 0.14 | 0.15 |
| (1,1569) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:70:GLN:HB2 | 2 | 0.14 | 0.15 |
| (1,1569) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:70:GLN:HB3 | 2 | 0.14 | 0.15 |
| (1,1569) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:70:GLN:HB2 | 2 | 0.14 | 0.15 |
| (1,1569) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:70:GLN:HB3 | 2 | 0.14 | 0.15 |
| (1,1521) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:9:LEU:HD11 | 2 | 0.05 | 0.07 |
| (1,1521) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:9:LEU:HD12 | 2 | 0.05 | 0.07 |
| (1,1521) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:9:LEU:HD13 | 2 | 0.05 | 0.07 |
| (1,1508) | 1:A:72:MET:HG3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 2 | 0.24 | 0.46 |
| (1,1508) | 1:A:72:MET:HG3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 2 | 0.24 | 0.46 |
| (1,1508) | 1:A:72:MET:HG3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 2 | 0.24 | 0.46 |
| (1,1489) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:ARG:HB2 | 2 | 0.08 | 0.09 |
| (1,1415) | 1:A:42:VAL:HG11 | 1:A:46:GLN:HE21 | 2 | 0.18 | 0.2 |
| (1,1415) | 1:A:42:VAL:HG12 | 1:A:46:GLN:HE21 | 2 | 0.18 | 0.2 |
| (1,1415) | 1:A:42:VAL:HG13 | 1:A:46:GLN:HE21 | 2 | 0.18 | 0.2 |
| (1,1378) | 1:A:12:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HA | 2 | 0.03 | 0.04 |
| (1,1378) | 1:A:12:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HA | 2 | 0.03 | 0.04 |
| (1,1378) | 1:A:12:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HA | 2 | 0.03 | 0.04 |
| (1,1354) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:67:ARG:HD3 | 2 | 0.13 | 0.2 |
| (1,1354) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:67:ARG:HD3 | 2 | 0.13 | 0.2 |
| (1,1354) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:67:ARG:HD3 | 2 | 0.13 | 0.2 |
| (1,1204) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:61:VAL:HB | 2 | 0.04 | 0.05 |
| (1,12) | 1:A:41:GLY:HA2 | 1:A:61:VAL:HG11 | 2 | 0.03 | 0.03 |
| (1,12) | 1:A:41:GLY:HA2 | 1:A:61:VAL:HG12 | 2 | 0.03 | 0.03 |
| (1,12) | 1:A:41:GLY:HA2 | 1:A:61:VAL:HG13 | 2 | 0.03 | 0.03 |
| (1,12) | 1:A:41:GLY:HA2 | 1:A:58:ILE:HD11 | 2 | 0.03 | 0.03 |
| (1,12) | 1:A:41:GLY:HA2 | 1:A:58:ILE:HD12 | 2 | 0.03 | 0.03 |
| (1,12) | 1:A:41:GLY:HA2 | 1:A:58:ILE:HD13 | 2 | 0.03 | 0.03 |
| (1,12) | 1:A:41:GLY:HA2 | 1:A:64:LEU:HD11 | 2 | 0.03 | 0.03 |
| (1,12) | 1:A:41:GLY:HA2 | 1:A:64:LEU:HD12 | 2 | 0.03 | 0.03 |
| (1,12) | 1:A:41:GLY:HA2 | 1:A:64:LEU:HD13 | 2 | 0.03 | 0.03 |
| (1,1196) | 1:A:56:LEU:HD21 | 1:A:56:LEU:HA | 2 | 0.72 | 0.95 |
| (1,1196) | 1:A:56:LEU:HD22 | 1:A:56:LEU:HA | 2 | 0.72 | 0.95 |
| (1,1196) | 1:A:56:LEU:HD23 | 1:A:56:LEU:HA | 2 | 0.72 | 0.95 |
| (1,1184) | 1:A:56:LEU:HB3 | 1:A:57:PRO:HG3 | 2 | 0.03 | 0.04 |
| (1,1160) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HA | 2 | 0.06 | 0.06 |
| (1,1160) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HA | 2 | 0.06 | 0.06 |
| (1,1160) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HA | 2 | 0.06 | 0.06 |
| (1,1133) | 1:A:53:ASP:HA | 1:A:53:ASP:H | 2 | 0.2 | 0.23 |
| (1,1100) | 1:A:40:MET:HG2 | 1:A:39:LEU:HD21 | 2 | 0.49 | 0.56 |
| (1,1100) | 1:A:40:MET:HG2 | 1:A:39:LEU:HD22 | 2 | 0.49 | 0.56 |
| (1,1100) | 1:A:40:MET:HG2 | 1:A:39:LEU:HD23 | 2 | 0.49 | 0.56 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|--------|----------|---------|
| (1,1086) | 1:A:39:LEU:HB2 | 1:A:41:GLY:H | 2 | 0.06 | 0.07 |
| (1,1064) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:42:VAL:H | 2 | 0.02 | 0.03 |
| (1,1064) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:42:VAL:H | 2 | 0.02 | 0.03 |
| (1,1064) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:42:VAL:H | 2 | 0.02 | 0.03 |
| (1,1052) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:41:GLY:HA2 | 2 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1052) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:41:GLY:HA2 | 2 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1052) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:41:GLY:HA2 | 2 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1049) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:40:MET:HB3 | 2 | 0.14 | 0.21 |
| (1,1049) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:40:MET:HB3 | 2 | 0.14 | 0.21 |
| (1,1049) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:40:MET:HB3 | 2 | 0.14 | 0.21 |
| (1,1000) | 1:A:33:ASP:HB2 | 1:A:35:GLY:H | 2 | 0.01 | 0.02 |
| (1,999) | 1:A:33:ASP:HB3 | 1:A:35:GLY:H | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,989) | 1:A:31:LEU:HB3 | 1:A:36:LEU:HB3 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,969) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:27:LEU:HA | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,969) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:27:LEU:HA | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,969) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:27:LEU:HA | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,952) | 1:A:11:LYS:HG2 | 1:A:11:LYS:H | 1 | 0.21 | 0.21 |
| (1,943) | 1:A:57:PRO:HD2 | 1:A:56:LEU:HD21 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,943) | 1:A:57:PRO:HD2 | 1:A:56:LEU:HD22 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,943) | 1:A:57:PRO:HD2 | 1:A:56:LEU:HD23 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,882) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:70:GLN:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,882) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:70:GLN:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,882) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:70:GLN:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,867) | 1:A:10:VAL:HB | 1:A:11:LYS:H | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,842) | 1:A:8:ASP:HA | 1:A:9:LEU:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,841) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:H | 1 | 0.11 | 0.11 |
| (1,799) | 1:A:51:GLU:HG2 | 1:A:47:ILE:HG21 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,799) | 1:A:51:GLU:HG2 | 1:A:47:ILE:HG22 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,799) | 1:A:51:GLU:HG2 | 1:A:47:ILE:HG23 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,799) | 1:A:51:GLU:HG3 | 1:A:47:ILE:HG21 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,799) | 1:A:51:GLU:HG3 | 1:A:47:ILE:HG22 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,799) | 1:A:51:GLU:HG3 | 1:A:47:ILE:HG23 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,774) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HG3 | 1 | 0.22 | 0.22 |
| (1,754) | 1:A:70:GLN:HG3 | 1:A:72:MET:H | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,753) | 1:A:70:GLN:HG2 | 1:A:72:MET:H | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,746) | 1:A:70:GLN:HG2 | 1:A:67:ARG:HA | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,739) | 1:A:70:GLN:HA | 1:A:71:GLU:HB2 | 1 | 0.42 | 0.42 |
| (1,730) | 1:A:63:GLN:HG2 | 1:A:60:GLU:HA | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,720) | 1:A:63:GLN:HB3 | 1:A:63:GLN:HE21 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,66) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:45:ARG:HE | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,66) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:45:ARG:HE | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,66) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:45:ARG:HE | 1 | 0.02 | 0.02 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|---------|-----------------|--------------------|--------|----------|---------|
| (1,66) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:63:GLN:HE22 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,66) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:63:GLN:HE22 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,66) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:63:GLN:HE22 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,66) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:29:SER:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,66) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:29:SER:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,66) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:29:SER:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,66) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,66) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,66) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,621) | 1:A:67:ARG:HD3 | 1:A:69:LEU:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,603) | 1:A:66:LEU:HA | 1:A:69:LEU:HB3 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,577) | 1:A:66:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HB2 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,572) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:44:VAL:HG21 | 1 | 0.76 | 0.76 |
| (1,572) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:44:VAL:HG22 | 1 | 0.76 | 0.76 |
| (1,572) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:44:VAL:HG23 | 1 | 0.76 | 0.76 |
| (1,571) | 1:A:43:GLU:HB3 | 1:A:44:VAL:HG21 | 1 | 0.19 | 0.19 |
| (1,571) | 1:A:43:GLU:HB3 | 1:A:44:VAL:HG22 | 1 | 0.19 | 0.19 |
| (1,571) | 1:A:43:GLU:HB3 | 1:A:44:VAL:HG23 | 1 | 0.19 | 0.19 |
| (1,568) | 1:A:72:MET:HG2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 1 | 0.09 | 0.09 |
| (1,568) | 1:A:72:MET:HG2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 1 | 0.09 | 0.09 |
| (1,568) | 1:A:72:MET:HG2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 1 | 0.09 | 0.09 |
| (1,566) | 1:A:72:MET:HG2 | 1:A:68:LYS:HB2 | 1 | 0.67 | 0.67 |
| (1,566) | 1:A:72:MET:HG2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 1 | 0.67 | 0.67 |
| (1,533) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:25:ILE:HA | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,533) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:25:ILE:HA | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,533) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:25:ILE:HA | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,53) | 1:A:59:ARG:HG2 | 1:A:58:ILE:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,53) | 1:A:19:ILE:HG13 | 1:A:67:ARG:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,521) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:27:LEU:HD21 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,521) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:27:LEU:HD22 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,521) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:27:LEU:HD23 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,50) | 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:39:LEU:HA | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,50) | 1:A:16:ILE:HG22 | 1:A:39:LEU:HA | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,50) | 1:A:16:ILE:HG23 | 1:A:39:LEU:HA | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,50) | 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:36:LEU:HA | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,50) | 1:A:16:ILE:HG22 | 1:A:36:LEU:HA | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,50) | 1:A:16:ILE:HG23 | 1:A:36:LEU:HA | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,498) | 1:A:47:ILE:HD11 | 1:A:43:GLU:HG3 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,498) | 1:A:47:ILE:HD12 | 1:A:43:GLU:HG3 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,498) | 1:A:47:ILE:HD13 | 1:A:43:GLU:HG3 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| | | 4 4 40 01 11 11 00 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,49) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:43:GLU:HG3 | 1 | 0.01 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|--------|----------|---------|
| (1,49) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:43:GLU:HG3 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,49) | 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:43:GLU:HG3 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,49) | 1:A:16:ILE:HG22 | 1:A:43:GLU:HG3 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,49) | 1:A:16:ILE:HG23 | 1:A:43:GLU:HG3 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,47) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:14:ALA:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,47) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:14:ALA:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,47) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:14:ALA:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,47) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:66:LEU:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,47) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:66:LEU:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,47) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:66:LEU:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,453) | 1:A:47:ILE:HA | 1:A:50:ARG:H | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,447) | 1:A:47:ILE:HA | 1:A:51:GLU:HG2 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,447) | 1:A:47:ILE:HA | 1:A:51:GLU:HG3 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,40) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:72:MET:HB2 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,40) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:72:MET:HB2 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,40) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:72:MET:HB2 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,40) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:63:GLN:HB2 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,40) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:63:GLN:HB2 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,40) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:63:GLN:HB2 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,40) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:72:MET:HB2 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,40) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:72:MET:HB2 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,40) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:72:MET:HB2 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,40) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:63:GLN:HB2 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,40) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:63:GLN:HB2 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,40) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:63:GLN:HB2 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,374) | 1:A:19:ILE:HB | 1:A:18:GLY:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,303) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:37:ASP:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,25) | 1:A:52:HIS:HB2 | 1:A:48:LEU:HA | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,25) | 1:A:52:HIS:HB2 | 1:A:74:SER:HB3 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,228) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:31:LEU:HD21 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,228) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:31:LEU:HD22 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,228) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:31:LEU:HD23 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,224) | 1:A:31:LEU:HB2 | 1:A:36:LEU:HD21 | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,224) | 1:A:31:LEU:HB2 | 1:A:36:LEU:HD22 | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,224) | 1:A:31:LEU:HB2 | 1:A:36:LEU:HD23 | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,222) | 1:A:31:LEU:HB3 | 1:A:36:LEU:HD21 | 1 | 0.41 | 0.41 |
| (1,222) | 1:A:31:LEU:HB3 | 1:A:36:LEU:HD22 | 1 | 0.41 | 0.41 |
| (1,222) | 1:A:31:LEU:HB3 | 1:A:36:LEU:HD23 | 1 | 0.41 | 0.41 |
| (1,209) | 1:A:30:SER:HB2 | 1:A:31:LEU:H | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,201) | 1:A:29:SER:HB2 | 1:A:30:SER:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,20) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:19:ILE:HD11 | 1 | 0.16 | 0.16 |
| (1,20) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:19:ILE:HD12 | 1 | 0.16 | 0.16 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|--------|----------|---------|
| (1,20) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:19:ILE:HD13 | 1 | 0.16 | 0.16 |
| (1,20) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:69:LEU:HD21 | 1 | 0.16 | 0.16 |
| (1,20) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:69:LEU:HD22 | 1 | 0.16 | 0.16 |
| (1,20) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:69:LEU:HD23 | 1 | 0.16 | 0.16 |
| (1,20) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:27:LEU:HD21 | 1 | 0.16 | 0.16 |
| (1,20) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:27:LEU:HD22 | 1 | 0.16 | 0.16 |
| (1,20) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:27:LEU:HD23 | 1 | 0.16 | 0.16 |
| (1,197) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HB3 | 1 | 1.08 | 1.08 |
| (1,196) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HB2 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,195) | 1:A:29:SER:HB2 | 1:A:34:LEU:HG | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1724) | 1:A:78:SER:H | 1:A:77:GLY:H | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1715) | 1:A:67:ARG:H | 1:A:67:ARG:HE | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1679) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:22:LEU:H | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1675) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:ARG:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1663) | 1:A:11:LYS:H | 1:A:15:HIS:H | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1654) | 1:A:29:SER:H | 1:A:28:ASP:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1645) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:9:LEU:H | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1645) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:9:LEU:H | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1645) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:9:LEU:H | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1643) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:72:MET:H | 1 | 0.26 | 0.26 |
| (1,1643) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:72:MET:H | 1 | 0.26 | 0.26 |
| (1,1643) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:72:MET:H | 1 | 0.26 | 0.26 |
| (1,1630) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:10:VAL:HG21 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1630) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:10:VAL:HG22 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1630) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:10:VAL:HG23 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1610) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:9:LEU:HD11 | 1 | 0.59 | 0.59 |
| (1,1610) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:9:LEU:HD12 | 1 | 0.59 | 0.59 |
| (1,1610) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:9:LEU:HD13 | 1 | 0.59 | 0.59 |
| (1,1610) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:9:LEU:HD11 | 1 | 0.59 | 0.59 |
| (1,1610) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:9:LEU:HD12 | 1 | 0.59 | 0.59 |
| (1,1610) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:9:LEU:HD13 | 1 | 0.59 | 0.59 |
| (1,1610) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:9:LEU:HD11 | 1 | 0.59 | 0.59 |
| (1,1610) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:9:LEU:HD12 | 1 | 0.59 | 0.59 |
| (1,1610) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:9:LEU:HD13 | 1 | 0.59 | 0.59 |
| (1,1600) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:40:MET:HG3 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1600) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:40:MET:HG3 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1600) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:40:MET:HG3 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1596) | 1:A:12:ALA:HA | 1:A:7:ARG:HD2 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1596) | 1:A:12:ALA:HA | 1:A:7:ARG:HD3 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1585) | 1:A:59:ARG:HG3 | 1:A:57:PRO:HB3 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,1580) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:20:ARG:HD2 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,1580) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:20:ARG:HD3 | 1 | 0.03 | 0.03 |



Continued from previous page...

| (1,1580) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:20:ARG:HD2 1 0.03 0.03 (1,1580) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:20:ARG:HD2 1 0.03 0.03 (1,1580) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:20:ARG:HD2 1 0.03 0.03 (1,1570) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:11:LYS:HE2 1 0.05 0.05 (1,1579) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:11:LYS:HE2 1 0.05 0.05 (1,1579) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:11:LYS:HE2 1 0.05 0.05 (1,1579) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:11:LYS:HE3 1 0.05 0.05 (1,1579) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:11:LYS:HE3 1 0.05 0.05 (1,1579) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:11:LYS:HE3 1 0.05 0.05 (1,1573) 1:A:16:LE:HG21 1:A:40:MET:HG3 1 0.03 0.03 (1,1573) 1:A:16:LE:HG22 1:A:40:MET:HG3 1 0.03 0.03 (1,1567) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 <td< th=""><th>Key</th><th>Atom-1</th><th>Atom-2</th><th>Models</th><th>Mean (Å)</th><th>Max (Å)</th></td<> | Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|--|----------|-----------------|-----------------|--------|----------|---------|
| (1,1580) I:A:14:ALA:HB3 | (1,1580) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:20:ARG:HD2 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| 1.1. | (1,1580) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:20:ARG:HD3 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,1579) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:11:LYS:HE2 1 0.05 0.05 (1,1579) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:11:LYS:HE3 1 0.05 0.05 (1,1579) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:11:LYS:HE2 1 0.05 0.05 (1,1579) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:11:LYS:HE3 1 0.05 0.05 (1,1579) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:11:LYS:HE3 1 0.05 0.05 (1,1579) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:11:LYS:HE3 1 0.05 0.05 (1,1579) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:11:LYS:HE3 1 0.05 0.05 (1,1573) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:40:MET:HG3 1 0.03 0.03 (1,1573) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:40:MET:HG3 1 0.03 0.03 (1,1573) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:40:MET:HG3 1 0.03 0.03 (1,1573) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:40:MET:HG3 1 0.03 0.03 (1,1573) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:40:MET:HG3 1 0.02 0.02 (1,1567) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1567) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1567) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1566) 1:A:68:IYS:HD3 1:A:64:IEU:H 1 0.75 0.75 (1,1566) 1:A:68:IYS:HD3 1:A:64:IEU:H 1 0.75 0.75 (1,1566) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1549) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.03 0.03 (1,1534) 1:A:10:VAL:HB3 1:A:40:MET:HB4 1 0.01 0.01 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG21 1:A: | (1,1580) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:20:ARG:HD2 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,1579) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:11:LYS:HE3 1 0.05 0.05 (1,1579) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:11:LYS:HE2 1 0.05 0.05 (1,1579) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:11:LYS:HE3 1 0.05 0.05 (1,1579) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:11:LYS:HE3 1 0.05 0.05 (1,1579) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:11:LYS:HE3 1 0.05 0.05 (1,1579) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:11:LYS:HE3 1 0.05 0.05 (1,1573) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:40:MET:HG3 1 0.03 0.03 (1,1573) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:40:MET:HG3 1 0.03 0.03 (1,1573) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:40:MET:HG3 1 0.03 0.03 (1,1567) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1567) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1567) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1567) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:64:LEU:H 1 0.75 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:64:LEU:H 1 0.75 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:64:LEU:H 1 0.75 0.75 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:44:VAL:H 1 1.03 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB3 1 0.027 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:H | (1,1580) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:20:ARG:HD3 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,1579) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:11:LYS:HE2 1 0.05 0.05 (1,1579) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:11:LYS:HE3 1 0.05 0.05 (1,1579) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:11:LYS:HE2 1 0.05 0.05 (1,1579) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:11:LYS:HE3 1 0.05 0.05 (1,1573) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:40:MET:HG3 1 0.03 0.03 (1,1573) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:40:MET:HG3 1 0.03 0.03 (1,1567) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1567) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1567) 1:A:68:LYS:HD21 1:A:64:LEU:H 1 0.75 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:24:LEU:H 1 0.75 0.75 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:24:VAL:H 1 1.03 | (1,1579) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:11:LYS:HE2 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,1579) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:11:LYS:HE3 1 0.05 0.05 (1,1579) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:11:LYS:HE2 1 0.05 0.05 (1,1579) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:11:LYS:HE2 1 0.05 0.05 (1,1573) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:40:MET:HG3 1 0.03 0.03 (1,1573) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:40:MET:HG3 1 0.03 0.03 (1,1573) 1:A:5:ILE:HG23 1:A:40:MET:HG3 1 0.03 0.03 (1,1567) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:5:T:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1567) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:5:T:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:64:LEU:H 1 0.75 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:64:LEU:H 1 0.75 0.75 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1541) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:44:VAL:H 1 0.03 <td< td=""><td>(1,1579)</td><td>1:A:14:ALA:HB1</td><td>1:A:11:LYS:HE3</td><td>1</td><td>0.05</td><td>0.05</td></td<> | (1,1579) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:11:LYS:HE3 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,1579) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:11:LYS:HE2 1 0.05 0.05 (1,1579) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:11:LYS:HE3 1 0.05 0.05 (1,1579) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:11:LYS:HE3 1 0.05 0.05 (1,1573) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:40:MET:HG3 1 0.03 0.03 (1,1573) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:40:MET:HG3 1 0.03 0.03 (1,1573) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:40:MET:HG3 1 0.03 0.03 (1,1573) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:40:MET:HG3 1 0.00 0.03 (1,1567) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1567) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1567) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:64:LEU:H 1 0.75 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:64:LEU:H 1 0.75 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:64:LEU:H 1 0.75 0.75 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:44:VAL:H 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1543) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1544) 1:A:40:VAL:HG22 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1544) 1:A:40:VAL:HG22 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB3 1 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0 | (1,1579) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:11:LYS:HE2 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,1579) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:11:LYS:HE3 1 0.05 0.05 (1,1573) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:40:MET:HG3 1 0.03 0.03 (1,1573) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:40:MET:HG3 1 0.03 0.03 (1,1573) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:40:MET:HG3 1 0.03 0.03 (1,1567) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1567) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1567) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:64:LEU:H 1 0.75 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:64:LEU:H 1 0.75 0.75 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:24:VAL:HG21 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1 | (1,1579) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:11:LYS:HE3 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,1573) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:40:MET:HG3 1 0.03 0.03 (1,1573) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:40:MET:HG3 1 0.03 0.03 (1,1573) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:40:MET:HG3 1 0.03 0.03 (1,1567) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1567) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1567) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1567) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:64:LEU:H 1 0.75 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:64:LEU:H 1 0.75 0.75 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG31 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG31 1:A:40:MET:HA 1 0.04 0.04 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG11 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG11 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG31 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1550) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD22 1 0.11 0.11 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD22 1 0.11 0.11 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD23 1 0.11 0.11 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD23 1 0.11 0.11 (1,1546) 1:A:44:ALA:HB3 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB3 | (1,1579) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:11:LYS:HE2 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,1573) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:40:MET:HG3 1 0.03 0.03 (1,1573) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:40:MET:HG3 1 0.03 0.03 (1,1567) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1567) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1567) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:64:LEU:H 1 0.75 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:64:LEU:H 1 0.75 0.75 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1541) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0 | (1,1579) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:11:LYS:HE3 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,1573) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:40:MET:HG3 1 0.03 0.03 (1,1567) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1567) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1567) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:64:LEU:H 1 0.75 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:64:LEU:H 1 0.75 0.75 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1541) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 | (1,1573) | 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:40:MET:HG3 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,1567) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1567) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1567) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:64:LEU:H 1 0.75 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:64:LEU:H 1 0.75 0.75 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:42:AL:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:44:VAL:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 </td <td>(1,1573)</td> <td>1:A:16:ILE:HG22</td> <td>1:A:40:MET:HG3</td> <td>1</td> <td>0.03</td> <td>0.03</td> | (1,1573) | 1:A:16:ILE:HG22 | 1:A:40:MET:HG3 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,1567) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1567) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:64:LEU:H 1 0.75 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:64:LEU:H 1 0.75 0.75 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1564) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 </td <td>(1,1573)</td> <td>1:A:16:ILE:HG23</td> <td>1:A:40:MET:HG3</td> <td>1</td> <td>0.03</td> <td>0.03</td> | (1,1573) | 1:A:16:ILE:HG23 | 1:A:40:MET:HG3 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,1567) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:57:PRO:HB3 1 0.02 0.02 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:64:LEU:H 1 0.75 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:64:LEU:H 1 0.75 0.75 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 <td>(1,1567)</td> <td>1:A:55:VAL:HG11</td> <td>1:A:57:PRO:HB3</td> <td>1</td> <td>0.02</td> <td>0.02</td> | (1,1567) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:57:PRO:HB3 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1566) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:64:LEU:H 1 0.75 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:64:LEU:H 1 0.75 0.75 (1,1561) 1:A:68:LYS:HD21 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1564) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HB2 1 0.2 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 | (1,1567) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:57:PRO:HB3 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1566) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:64:LEU:H 1 0.75 0.75 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1564) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 <td>(1,1567)</td> <td>1:A:55:VAL:HG13</td> <td>1:A:57:PRO:HB3</td> <td>1</td> <td>0.02</td> <td>0.02</td> | (1,1567) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:57:PRO:HB3 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1561) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 </td <td>(1,1566)</td> <td>1:A:68:LYS:HD2</td> <td>1:A:64:LEU:H</td> <td>1</td> <td>0.75</td> <td>0.75</td> | (1,1566) | 1:A:68:LYS:HD2 | 1:A:64:LEU:H | 1 | 0.75 | 0.75 |
| (1,1561) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1561) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:40:MET:HA 1 0.07 0.27 </td <td>(1,1566)</td> <td>1:A:68:LYS:HD3</td> <td>1:A:64:LEU:H</td> <td>1</td> <td>0.75</td> <td>0.75</td> | (1,1566) | 1:A:68:LYS:HD3 | 1:A:64:LEU:H | 1 | 0.75 | 0.75 |
| (1,1561) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:23:ALA:HA 1 0.01 0.01 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 </td <td>(1,1561)</td> <td>1:A:22:LEU:HD21</td> <td>1:A:23:ALA:HA</td> <td>1</td> <td>0.01</td> <td>0.01</td> | (1,1561) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:23:ALA:HA | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1544) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HA 1 0.02 0.27 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG11 1:A:70:GLN:HE21 1 0.04 0.04 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG12 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0. | (1,1561) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:23:ALA:HA | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1544) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1544) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1530) 1:A:44:VAL:HB 1:A:48:LEU:H 1 0.04 0.04 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG11 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 </td <td>(1,1561)</td> <td>1:A:22:LEU:HD23</td> <td>1:A:23:ALA:HA</td> <td>1</td> <td>0.01</td> <td>0.01</td> | (1,1561) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:23:ALA:HA | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1544) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:44:VAL:H 1 1.03 1.03 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1530) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:40:MET:HA 1 0.027 0.27 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG11 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG12 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG13 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 < | (1,1544) | 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:44:VAL:H | 1 | 1.03 | 1.03 |
| (1,1542) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1534) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1539) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:48:LEU:H 1 0.04 0.04 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG11 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG13 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1534) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD21 1 0.11 0.11 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD22 1 0.11 0. | (1,1544) | 1:A:44:VAL:HG22 | 1:A:44:VAL:H | 1 | 1.03 | 1.03 |
| (1,1542) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1539) 1:A:44:VAL:HB 1:A:48:LEU:H 1 0.04 0.04 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG11 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG12 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG13 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG13 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HD21 1 0.11 0.11 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD22 1 0.11 < | (1,1544) | 1:A:44:VAL:HG23 | 1:A:44:VAL:H | 1 | 1.03 | 1.03 |
| (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 1 0.3 0.3 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1539) 1:A:44:VAL:HB 1:A:48:LEU:H 1 0.04 0.04 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG11 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG12 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG13 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1534) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD21 1 0.11 0.11 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD22 1 0.11 0.11 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD23 1 0.11 0.11 (1,1501) 1:A:49:GLU:HA 1:A:53:ASP:HB3 1 0.02 0. | (1,1542) | 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:40:MET:HB2 | 1 | 0.3 | 0.3 |
| (1,1540) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1539) 1:A:44:VAL:HB 1:A:48:LEU:H 1 0.04 0.04 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG11 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG12 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG13 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1534) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD21 1 0.11 0.11 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD22 1 0.11 0.11 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD23 1 0.11 0.11 (1,1501) 1:A:49:GLU:HA 1:A:53:ASP:HB3 1 0.02 0.02 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.0 | (1,1542) | 1:A:44:VAL:HG22 | 1:A:40:MET:HB2 | 1 | 0.3 | 0.3 |
| (1,1540) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1540) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1539) 1:A:44:VAL:HB 1:A:48:LEU:H 1 0.04 0.04 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG11 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG12 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG13 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD21 1 0.11 0.11 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD22 1 0.11 0.11 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD23 1 0.11 0.11 (1,1501) 1:A:49:GLU:HA 1:A:53:ASP:HB3 1 0.02 0.02 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01< | (1,1542) | 1:A:44:VAL:HG23 | 1:A:40:MET:HB2 | 1 | 0.3 | 0.3 |
| (1,1540) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HA 1 0.27 0.27 (1,1539) 1:A:44:VAL:HB 1:A:48:LEU:H 1 0.04 0.04 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG11 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG12 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG13 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD21 1 0.11 0.11 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD22 1 0.11 0.11 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD23 1 0.11 0.11 (1,1501) 1:A:49:GLU:HA 1:A:53:ASP:HB3 1 0.02 0.02 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 <td>(1,1540)</td> <td>1:A:44:VAL:HG21</td> <td>1:A:40:MET:HA</td> <td>1</td> <td>0.27</td> <td>0.27</td> | (1,1540) | 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:40:MET:HA | 1 | 0.27 | 0.27 |
| (1,1539) 1:A:44:VAL:HB 1:A:48:LEU:H 1 0.04 0.04 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG11 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG12 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG13 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD21 1 0.11 0.11 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD22 1 0.11 0.11 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD23 1 0.11 0.11 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD23 1 0.11 0.11 (1,1501) 1:A:49:GLU:HA 1:A:53:ASP:HB3 1 0.02 0.02 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 <td>(1,1540)</td> <td>1:A:44:VAL:HG22</td> <td>1:A:40:MET:HA</td> <td>1</td> <td>0.27</td> <td>0.27</td> | (1,1540) | 1:A:44:VAL:HG22 | 1:A:40:MET:HA | 1 | 0.27 | 0.27 |
| (1,1534) 1:A:10:VAL:HG11 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG12 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG13 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD21 1 0.11 0.11 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD22 1 0.11 0.11 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD23 1 0.11 0.11 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD23 1 0.11 0.11 (1,1501) 1:A:49:GLU:HA 1:A:53:ASP:HB3 1 0.02 0.02 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 | (1,1540) | 1:A:44:VAL:HG23 | 1:A:40:MET:HA | 1 | 0.27 | 0.27 |
| (1,1534) 1:A:10:VAL:HG12 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1534) 1:A:10:VAL:HG13 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD21 1 0.11 0.11 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD22 1 0.11 0.11 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD23 1 0.11 0.11 (1,1501) 1:A:49:GLU:HA 1:A:53:ASP:HB3 1 0.02 0.02 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 | (1,1539) | 1:A:44:VAL:HB | 1:A:48:LEU:H | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,1534) 1:A:10:VAL:HG13 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD21 1 0.11 0.11 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD22 1 0.11 0.11 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD23 1 0.11 0.11 (1,1501) 1:A:49:GLU:HA 1:A:53:ASP:HB3 1 0.02 0.02 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 | (1,1534) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:70:GLN:HE21 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,1534) 1:A:10:VAL:HG13 1:A:70:GLN:HE21 1 0.03 0.03 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD21 1 0.11 0.11 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD22 1 0.11 0.11 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD23 1 0.11 0.11 (1,1501) 1:A:49:GLU:HA 1:A:53:ASP:HB3 1 0.02 0.02 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 | (' | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:70:GLN:HE21 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD21 1 0.11 0.11 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD22 1 0.11 0.11 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD23 1 0.11 0.11 (1,1501) 1:A:49:GLU:HA 1:A:53:ASP:HB3 1 0.02 0.02 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 | | 1:A:10:VAL:HG13 | | | | |
| (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD22 1 0.11 0.11 (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD23 1 0.11 0.11 (1,1501) 1:A:49:GLU:HA 1:A:53:ASP:HB3 1 0.02 0.02 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 | · · / | 1:A:73:SER:HA | | | | |
| (1,1525) 1:A:73:SER:HA 1:A:9:LEU:HD23 1 0.11 0.11 (1,1501) 1:A:49:GLU:HA 1:A:53:ASP:HB3 1 0.02 0.02 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 | ` ′ | 1:A:73:SER:HA | | | | |
| (1,1501) 1:A:49:GLU:HA 1:A:53:ASP:HB3 1 0.02 0.02 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 | · · / | | 1:A:9:LEU:HD23 | | | |
| (1,1476) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 | , , | 1:A:49:GLU:HA | | | | |
| (1,1476) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 (1,1476) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 | (' | | | | | |
| (1,1476) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:15:HIS:H 1 0.01 0.01 | · · / | | | | | |
| | · / | | | | | |
| | (1,1427) | | | | | |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|--------|----------|---------|
| (1,1427) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:42:VAL:H | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1427) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:42:VAL:H | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1404) | 1:A:42:VAL:HB | 1:A:42:VAL:H | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,1400) | 1:A:44:VAL:HB | 1:A:45:ARG:HE | 1 | 0.12 | 0.12 |
| (1,1394) | 1:A:44:VAL:HA | 1:A:44:VAL:HG11 | 1 | 0.16 | 0.16 |
| (1,1394) | 1:A:44:VAL:HA | 1:A:44:VAL:HG12 | 1 | 0.16 | 0.16 |
| (1,1394) | 1:A:44:VAL:HA | 1:A:44:VAL:HG13 | 1 | 0.16 | 0.16 |
| (1,1389) | 1:A:12:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD21 | 1 | 0.33 | 0.33 |
| (1,1389) | 1:A:12:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD22 | 1 | 0.33 | 0.33 |
| (1,1389) | 1:A:12:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD23 | 1 | 0.33 | 0.33 |
| (1,1389) | 1:A:12:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD21 | 1 | 0.33 | 0.33 |
| (1,1389) | 1:A:12:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD22 | 1 | 0.33 | 0.33 |
| (1,1389) | 1:A:12:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD23 | 1 | 0.33 | 0.33 |
| (1,1389) | 1:A:12:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD21 | 1 | 0.33 | 0.33 |
| (1,1389) | 1:A:12:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD22 | 1 | 0.33 | 0.33 |
| (1,1389) | 1:A:12:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD23 | 1 | 0.33 | 0.33 |
| (1,1387) | 1:A:12:ALA:HB1 | 1:A:7:ARG:HB2 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1387) | 1:A:12:ALA:HB2 | 1:A:7:ARG:HB2 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1387) | 1:A:12:ALA:HB3 | 1:A:7:ARG:HB2 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1367) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:68:LYS:HG2 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,1367) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:68:LYS:HG3 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,1331) | 1:A:68:LYS:HG2 | 1:A:64:LEU:HD21 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,1331) | 1:A:68:LYS:HG2 | 1:A:64:LEU:HD22 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,1331) | 1:A:68:LYS:HG2 | 1:A:64:LEU:HD23 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,1331) | 1:A:68:LYS:HG3 | 1:A:64:LEU:HD21 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,1331) | 1:A:68:LYS:HG3 | 1:A:64:LEU:HD22 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,1331) | 1:A:68:LYS:HG3 | 1:A:64:LEU:HD23 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,1328) | 1:A:68:LYS:HD2 | 1:A:65:THR:H | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1328) | 1:A:68:LYS:HD3 | 1:A:65:THR:H | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1325) | 1:A:67:ARG:HD2 | 1:A:67:ARG:HA | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1285) | 1:A:62:ARG:HD2 | 1:A:32:ALA:HB1 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,1285) | 1:A:62:ARG:HD2 | 1:A:32:ALA:HB2 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,1285) | 1:A:62:ARG:HD2 | 1:A:32:ALA:HB3 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,1274) | 1:A:62:ARG:HA | 1:A:63:GLN:HE22 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1246) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:64:LEU:HG | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1241) | 1:A:60:GLU:HB2 | 1:A:61:VAL:HG21 | 1 | 0.41 | 0.41 |
| (1,1241) | 1:A:60:GLU:HB2 | 1:A:61:VAL:HG22 | 1 | 0.41 | 0.41 |
| (1,1241) | 1:A:60:GLU:HB2 | 1:A:61:VAL:HG23 | 1 | 0.41 | 0.41 |
| (1,1203) | 1:A:56:LEU:HD21 | 1:A:54:LEU:HA | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1203) | 1:A:56:LEU:HD22 | 1:A:54:LEU:HA | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1203) | 1:A:56:LEU:HD23 | 1:A:54:LEU:HA | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1202) | 1:A:56:LEU:HD21 | 1:A:55:VAL:HB | 1 | 1.3 | 1.3 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|--------|----------|---------|
| (1,1202) | 1:A:56:LEU:HD22 | 1:A:55:VAL:HB | 1 | 1.3 | 1.3 |
| (1,1202) | 1:A:56:LEU:HD23 | 1:A:55:VAL:HB | 1 | 1.3 | 1.3 |
| (1,1200) | 1:A:56:LEU:HD21 | 1:A:55:VAL:H | 1 | 1.14 | 1.14 |
| (1,1200) | 1:A:56:LEU:HD22 | 1:A:55:VAL:H | 1 | 1.14 | 1.14 |
| (1,1200) | 1:A:56:LEU:HD23 | 1:A:55:VAL:H | 1 | 1.14 | 1.14 |
| (1,1195) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:56:LEU:H | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,119) | 1:A:4:GLU:HB3 | 1:A:5:ALA:H | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,1182) | 1:A:56:LEU:HB3 | 1:A:57:PRO:HG2 | 1 | 0.08 | 0.08 |
| (1,1182) | 1:A:56:LEU:HB3 | 1:A:57:PRO:HB2 | 1 | 0.08 | 0.08 |
| (1,1180) | 1:A:55:VAL:HG21 | 1:A:53:ASP:HA | 1 | 0.27 | 0.27 |
| (1,1180) | 1:A:55:VAL:HG22 | 1:A:53:ASP:HA | 1 | 0.27 | 0.27 |
| (1,1180) | 1:A:55:VAL:HG23 | 1:A:53:ASP:HA | 1 | 0.27 | 0.27 |
| (1,1179) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:56:LEU:HB3 | 1 | 0.39 | 0.39 |
| (1,1179) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:56:LEU:HB3 | 1 | 0.39 | 0.39 |
| (1,1179) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:56:LEU:HB3 | 1 | 0.39 | 0.39 |
| (1,1162) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:52:HIS:HB2 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1162) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:52:HIS:HB2 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1162) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:52:HIS:HB2 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,116) | 1:A:55:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HB3 | 1 | 0.39 | 0.39 |
| (1,116) | 1:A:55:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HB3 | 1 | 0.39 | 0.39 |
| (1,116) | 1:A:55:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HB3 | 1 | 0.39 | 0.39 |
| (1,1149) | 1:A:54:LEU:HB3 | 1:A:48:LEU:HG | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1148) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:48:LEU:HG | 1 | 0.08 | 0.08 |
| (1,1140) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:H | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,114) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:57:PRO:HG3 | 1 | 0.37 | 0.37 |
| (1,114) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:57:PRO:HG3 | 1 | 0.37 | 0.37 |
| (1,114) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:57:PRO:HG3 | 1 | 0.37 | 0.37 |
| (1,1128) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:37:ASP:H | 1 | 0.59 | 0.59 |
| (1,1128) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:37:ASP:H | 1 | 0.59 | 0.59 |
| (1,1128) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:37:ASP:H | 1 | 0.59 | 0.59 |
| (1,1103) | 1:A:40:MET:HG3 | 1:A:40:MET:H | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1082) | 1:A:39:LEU:HB3 | 1:A:39:LEU:H | 1 | 0.23 | 0.23 |
| (1,1065) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:38:SER:H | 1 | 0.95 | 0.95 |
| (1,1065) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:38:SER:H | 1 | 0.95 | 0.95 |
| (1,1065) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:38:SER:H | 1 | 0.95 | 0.95 |
| (1,1047) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:44:VAL:HG21 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1047) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:44:VAL:HG22 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1047) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:44:VAL:HG23 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1047) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:44:VAL:HG21 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1047) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:44:VAL:HG22 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1047) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:44:VAL:HG23 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1047) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:44:VAL:HG21 | 1 | 0.01 | 0.01 |



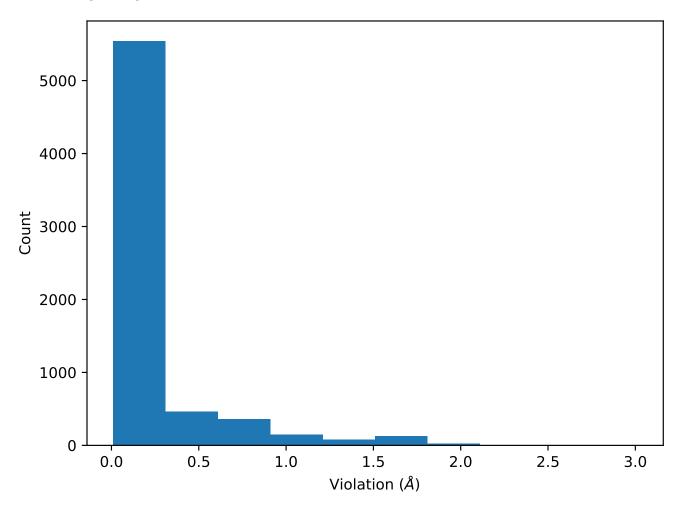
Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|--------|----------|---------|
| (1,1047) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:44:VAL:HG22 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1047) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:44:VAL:HG23 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,102) | 1:A:55:VAL:HG21 | 1:A:55:VAL:H | 1 | 0.85 | 0.85 |
| (1,102) | 1:A:55:VAL:HG22 | 1:A:55:VAL:H | 1 | 0.85 | 0.85 |
| (1,102) | 1:A:55:VAL:HG23 | 1:A:55:VAL:H | 1 | 0.85 | 0.85 |
| (1,1006) | 1:A:33:ASP:HB2 | 1:A:30:SER:H | 1 | 0.44 | 0.44 |
| (1,1001) | 1:A:33:ASP:HB2 | 1:A:33:ASP:H | 1 | 0.03 | 0.03 |

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) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1123) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:52:HIS:HB2 | 2 | 3.01 |
| (1,1123) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:52:HIS:HB2 | 2 | 3.01 |
| (1,1123) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:52:HIS:HB2 | 2 | 3.01 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB2 | 24 | 2.1 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB2 | 24 | 2.1 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB2 | 24 | 2.1 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB2 | 14 | 2.01 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB2 | 14 | 2.01 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB2 | 14 | 2.01 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:51:GLU:HB2 | 24 | 1.99 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:51:GLU:HB2 | 24 | 1.99 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:51:GLU:HB2 | 24 | 1.99 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB2 | 27 | 1.98 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB2 | 27 | 1.98 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB2 | 27 | 1.98 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB2 | 26 | 1.96 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB2 | 26 | 1.96 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB2 | 26 | 1.96 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB2 | 17 | 1.89 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB2 | 17 | 1.89 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB2 | 17 | 1.89 |
| (1,1589) | 1:A:20:ARG:HG3 | 1:A:67:ARG:HE | 18 | 1.88 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB2 | 13 | 1.87 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB2 | 13 | 1.87 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB2 | 13 | 1.87 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:51:GLU:HB2 | 21 | 1.82 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:51:GLU:HB2 | 21 | 1.82 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:51:GLU:HB2 | 21 | 1.82 |
| (1,900) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:48:LEU:HD11 | 18 | 1.74 |
| (1,900) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:48:LEU:HD12 | 18 | 1.74 |
| (1,900) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:48:LEU:HD13 | 18 | 1.74 |
| (1,900) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:48:LEU:HD11 | 18 | 1.74 |
| (1,900) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:48:LEU:HD12 | 18 | 1.74 |
| (1,900) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:48:LEU:HD13 | 18 | 1.74 |
| (1,900) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:48:LEU:HD11 | 18 | 1.74 |
| (1,900) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:48:LEU:HD12 | 18 | 1.74 |
| (1,900) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:48:LEU:HD13 | 18 | 1.74 |
| (1,444) | 1:A:47:ILE:HA | 1:A:50:ARG:HB3 | 28 | 1.72 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:26:ASN:HB3 | 19 | 1.72 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:26:ASN:HB3 | 19 | 1.72 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:26:ASN:HB3 | 19 | 1.72 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:51:GLU:HB2 | 4 | 1.72 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:51:GLU:HB2 | 4 | 1.72 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:51:GLU:HB2 | 4 | 1.72 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:51:GLU:HB2 | 29 | 1.72 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:51:GLU:HB2 | 29 | 1.72 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:51:GLU:HB2 | 29 | 1.72 |
| (1,444) | 1:A:47:ILE:HA | 1:A:50:ARG:HB3 | 23 | 1.71 |
| (1,900) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:48:LEU:HD11 | 2 | 1.7 |
| (1,900) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:48:LEU:HD12 | 2 | 1.7 |
| (1,900) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:48:LEU:HD13 | 2 | 1.7 |
| (1,900) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:48:LEU:HD11 | 2 | 1.7 |
| (1,900) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:48:LEU:HD12 | 2 | 1.7 |
| (1,900) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:48:LEU:HD13 | 2 | 1.7 |
| (1,900) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:48:LEU:HD11 | 2 | 1.7 |
| (1,900) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:48:LEU:HD12 | 2 | 1.7 |
| (1,900) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:48:LEU:HD13 | 2 | 1.7 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:70:GLN:HG3 | 28 | 1.69 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:70:GLN:HG3 | 28 | 1.69 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:70:GLN:HG3 | 28 | 1.69 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:26:ASN:HB3 | 17 | 1.68 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:26:ASN:HB3 | 17 | 1.68 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:26:ASN:HB3 | 17 | 1.68 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:26:ASN:HB3 | 29 | 1.67 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:26:ASN:HB3 | 29 | 1.67 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:26:ASN:HB3 | 29 | 1.67 |
| (1,1122) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:52:HIS:HB3 | 22 | 1.67 |
| (1,1122) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:52:HIS:HB3 | 22 | 1.67 |
| (1,1122) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:52:HIS:HB3 | 22 | 1.67 |
| (1,1589) | 1:A:20:ARG:HG3 | 1:A:67:ARG:HE | 16 | 1.66 |
| (1,444) | 1:A:47:ILE:HA | 1:A:50:ARG:HB3 | 15 | 1.65 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:70:GLN:HG3 | 16 | 1.65 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:70:GLN:HG3 | 16 | 1.65 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:70:GLN:HG3 | 16 | 1.65 |
| (1,1589) | 1:A:20:ARG:HG3 | 1:A:67:ARG:HE | 9 | 1.64 |
| (1,1555) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB3 | 27 | 1.64 |
| (1,1555) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB3 | 27 | 1.64 |
| (1,1555) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB3 | 27 | 1.64 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:70:GLN:HG3 | 5 | 1.62 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:70:GLN:HG3 | 5 | 1.62 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:70:GLN:HG3 | 5 | 1.62 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:70:GLN:HG3 | 8 | 1.62 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|-------|---------------|
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:70:GLN:HG3 | 8 | 1.62 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:70:GLN:HG3 | 8 | 1.62 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:70:GLN:HG3 | 11 | 1.62 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:70:GLN:HG3 | 11 | 1.62 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:70:GLN:HG3 | 11 | 1.62 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:70:GLN:HG3 | 19 | 1.62 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:70:GLN:HG3 | 19 | 1.62 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:70:GLN:HG3 | 19 | 1.62 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:51:GLU:HB2 | 2 | 1.61 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:51:GLU:HB2 | 2 | 1.61 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:51:GLU:HB2 | 2 | 1.61 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:70:GLN:HG3 | 18 | 1.6 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:70:GLN:HG3 | 18 | 1.6 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:70:GLN:HG3 | 18 | 1.6 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:70:GLN:HG3 | 25 | 1.59 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:70:GLN:HG3 | 25 | 1.59 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:70:GLN:HG3 | 25 | 1.59 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:70:GLN:HG3 | 1 | 1.58 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:70:GLN:HG3 | 1 | 1.58 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:70:GLN:HG3 | 1 | 1.58 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:70:GLN:HG3 | 9 | 1.57 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:70:GLN:HG3 | 9 | 1.57 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:70:GLN:HG3 | 9 | 1.57 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:70:GLN:HG3 | 22 | 1.57 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:70:GLN:HG3 | 22 | 1.57 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:70:GLN:HG3 | 22 | 1.57 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:70:GLN:HG3 | 30 | 1.57 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:70:GLN:HG3 | 30 | 1.57 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:70:GLN:HG3 | 30 | 1.57 |
| (1,778) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:6:GLN:HE21 | 3 | 1.56 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:70:GLN:HG3 | 6 | 1.56 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:70:GLN:HG3 | 6 | 1.56 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:70:GLN:HG3 | 6 | 1.56 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:70:GLN:HG3 | 27 | 1.56 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:70:GLN:HG3 | 27 | 1.56 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:70:GLN:HG3 | 27 | 1.56 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:26:ASN:HB3 | 14 | 1.56 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:26:ASN:HB3 | 14 | 1.56 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:26:ASN:HB3 | 14 | 1.56 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:70:GLN:HG3 | 23 | 1.55 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:70:GLN:HG3 | 23 | 1.55 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:70:GLN:HG3 | 23 | 1.55 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:51:GLU:HB2 | 1 | 1.55 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:51:GLU:HB2 | 1 | 1.55 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:51:GLU:HB2 | 1 | 1.55 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:70:GLN:HG3 | 17 | 1.54 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:70:GLN:HG3 | 17 | 1.54 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:70:GLN:HG3 | 17 | 1.54 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:9:LEU:HD21 | 18 | 1.52 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:9:LEU:HD22 | 18 | 1.52 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:9:LEU:HD23 | 18 | 1.52 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:48:LEU:HD11 | 18 | 1.52 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:48:LEU:HD12 | 18 | 1.52 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:48:LEU:HD13 | 18 | 1.52 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:70:GLN:HG3 | 4 | 1.52 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:70:GLN:HG3 | 4 | 1.52 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:70:GLN:HG3 | 4 | 1.52 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:70:GLN:HG3 | 12 | 1.52 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:70:GLN:HG3 | 12 | 1.52 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:70:GLN:HG3 | 12 | 1.52 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:70:GLN:HG3 | 26 | 1.52 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:70:GLN:HG3 | 26 | 1.52 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:70:GLN:HG3 | 26 | 1.52 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:70:GLN:HG3 | 29 | 1.52 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:70:GLN:HG3 | 29 | 1.52 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:70:GLN:HG3 | 29 | 1.52 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:70:GLN:HG3 | 10 | 1.51 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:70:GLN:HG3 | 10 | 1.51 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:70:GLN:HG3 | 10 | 1.51 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:70:GLN:HG3 | 13 | 1.51 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:70:GLN:HG3 | 13 | 1.51 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:70:GLN:HG3 | 13 | 1.51 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:70:GLN:HG3 | 20 | 1.51 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:70:GLN:HG3 | 20 | 1.51 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:70:GLN:HG3 | 20 | 1.51 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:70:GLN:HG3 | 21 | 1.5 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:70:GLN:HG3 | 21 | 1.5 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:70:GLN:HG3 | 21 | 1.5 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:70:GLN:HG3 | 24 | 1.48 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:70:GLN:HG3 | 24 | 1.48 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:70:GLN:HG3 | 24 | 1.48 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:70:GLN:HG3 | 14 | 1.46 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:70:GLN:HG3 | 14 | 1.46 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:70:GLN:HG3 | 14 | 1.46 |



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

| (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 26 1.46 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 26 1.46 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 26 1.46 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 2 1.45 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 2 1.45 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 2 1.45 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 10 1.43 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 15 1.43 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 15 1.43 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 15 1.43 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 15 1.43 (1,1123) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,1123) 1:A:48:LEU:HD12 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1: | (A) |
|---|-----|
| (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 26 1.46 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 2 1.45 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 2 1.45 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 2 1.45 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 10 1.43 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 15 1.43 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 15 1.43 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 15 1.43 (1,1581) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,1123) 1:A:48:LEU:HD12 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,1123) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 7 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A | |
| (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 2 1.45 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 2 1.45 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 2 1.45 (1,1581) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 10 1.43 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 15 1.43 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 15 1.43 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 15 1.43 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 15 1.43 (1,1581) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,1123) 1:A:48:LEU:HD12 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,1123) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 7 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A: | |
| (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 2 1.45 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 2 1.45 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 10 1.43 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 15 1.43 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 15 1.43 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 15 1.43 (1,1123) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,1123) 1:A:48:LEU:HD12 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,1123) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 7 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1 | |
| (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 2 1.45 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 10 1.43 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 15 1.43 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 15 1.43 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 15 1.43 (1,1581) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,1123) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,1123) 1:A:48:LEU:HD12 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,1123) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,778) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 7 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 <t< td=""><td></td></t<> | |
| (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 10 1.43 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 15 1.43 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 15 1.43 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 15 1.43 (1,1581) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,1123) 1:A:48:LEU:HD12 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,1123) 1:A:48:LEU:HD12 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,1123) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 7 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:20:ARG:HG3 | |
| (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 15 1.43 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 15 1.43 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 15 1.43 (1,1123) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,1123) 1:A:48:LEU:HD12 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,1123) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,1123) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 7 1.39 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 7 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:20:ARG:HG3 < | |
| (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 15 1.43 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 15 1.43 (1,1123) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,1123) 1:A:48:LEU:HD12 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,1123) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 7 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:67:ARG:HE 3 1.36 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 3 1.36 | |
| (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 15 1.43 (1,1123) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,1123) 1:A:48:LEU:HD12 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,1123) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 7 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 3 1.36 | |
| (1,1123) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,1123) 1:A:48:LEU:HD12 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,1123) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 7 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 3 1.36 | |
| (1,1123) 1:A:48:LEU:HD12 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,1123) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 7 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 3 1.36 | |
| (1,1123) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:52:HIS:HB2 22 1.42 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 7 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 3 1.36 | |
| (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 7 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 3 1.36 | |
| (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 3 1.36 | |
| (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 3 1.36 | |
| (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 19 1.39 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 3 1.36 | |
| (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 3 1.36 | |
| (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,972) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 3 1.36 | |
| (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 20 1.36 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 3 1.36 | |
| (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 3 1.36 | - |
| | |
| (1.1071) 1.4.60 ADC HA 1.4.70 H.D. HO10 | |
| (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 18 1.34 | |
| (1,900) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:48:LEU:HD11 22 1.33 | |
| (1,900) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:48:LEU:HD12 22 1.33 | |
| (1,900) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:48:LEU:HD13 22 1.33 | |
| (1,900) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:48:LEU:HD11 22 1.33 | |
| (1,900) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:48:LEU:HD12 22 1.33 | |
| (1,900) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:48:LEU:HD13 22 1.33 | |
| (1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD11 22 1.33 | |
| (1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD12 22 1.33 | |
| (1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD13 22 1.33 | |
| (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 20 1.33 | |
| (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 20 1.33 | |
| (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 20 1.33 | |
| (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 20 1.32 | |
| (1,1593) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HA 20 1.32 | |
| (1,1593) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HA 20 1.32 | |
| (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HA 20 1.32 | |
| (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 28 1.32 | |
| (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 28 1.32 | |
| (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 28 1.32 | |
| (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 14 1.31 | |



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

| (1,1638) 1:A:57:PRO:HB3 1:A:59:ARG:HB2 14 1.3 (1,1575) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:13:VAL:H 18 1.3 (1,1575) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:13:VAL:H 18 1.3 (1,1575) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:13:VAL:H 18 1.3 (1,1202) 1:A:66:LEU:HD21 1:A:55:VAL:HB 14 1.3 (1,1202) 1:A:56:LEU:HD22 1:A:55:VAL:HB 14 1.3 (1,1202) 1:A:56:LEU:HD23 1:A:60:ARG:HB3 13 1.29 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:66:GLN:HE21 13 1.28 (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1589) 1:A:29:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE <th></th> | |
|--|---|
| (1,1575) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:13:VAL:H 18 1.3 (1,1575) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:13:VAL:H 18 1.3 (1,1202) 1:A:56:LEU:HD21 1:A:55:VAL:HB 14 1.3 (1,1202) 1:A:56:LEU:HD22 1:A:55:VAL:HB 14 1.3 (1,1202) 1:A:56:LEU:HD23 1:A:55:VAL:HB 14 1.3 (1,1202) 1:A:56:LEU:HD23 1:A:55:VAL:HB 14 1.3 (1,1202) 1:A:56:LEU:HD23 1:A:50:ARG:HB3 13 1.29 (1,744) 1:A:47:ILE:HA 1:A:6:GLN:HE21 13 1.28 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 13 1.28 (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 12 1.27 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 25 1.26 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 | |
| (1,1575) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:13:VAL:H 18 1.3 (1,1202) 1:A:56:LEU:HD21 1:A:55:VAL:HB 14 1.3 (1,1202) 1:A:56:LEU:HD22 1:A:55:VAL:HB 14 1.3 (1,1202) 1:A:56:LEU:HD23 1:A:55:VAL:HB 14 1.3 (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 13 1.29 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 13 1.28 (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 12 1.27 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1589) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:48:LEU:HD11 18 1.25 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 18 1.25 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 18 1.25 (1,461) 1:A:62:ARG:HA 1:A:48:LEU | |
| (1,1202) 1:A:56:LEU:HD21 1:A:55:VAL:HB 14 1.3 (1,1202) 1:A:56:LEU:HD22 1:A:55:VAL:HB 14 1.3 (1,1202) 1:A:56:LEU:HD23 1:A:55:VAL:HB 14 1.3 (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 13 1.29 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 13 1.28 (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 12 1.27 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 25 1.26 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 18 1.25 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 18 1.25 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 18 1.25 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 7 1.25 | |
| (1,1202) 1:A:56:LEU:HD22 1:A:55:VAL:HB 14 1.3 (1,1202) 1:A:56:LEU:HD23 1:A:55:VAL:HB 14 1.3 (1,444) 1:A:56:LEU:HD23 1:A:50:ARG:HB3 13 1.29 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 13 1.28 (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 12 1.27 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:47:ARG:HE 25 1.26 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 18 1.25 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 18 1.25 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 18 1.25 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 7 1.25 | |
| (1,1202) 1:A:56:LEU:HD23 1:A:55:VAL:HB 14 1.3 (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 13 1.29 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 13 1.28 (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 12 1.27 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:49:SER:HA 14 1.26 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 25 1.26 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 18 1.25 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 18 1.25 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 18 1.25 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 7 1.25 | |
| (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 13 1.29 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 13 1.28 (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 12 1.27 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:67:ARG:HE 25 1.26 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 25 1.26 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 18 1.25 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 18 1.25 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 18 1.25 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 7 1.25 | |
| (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 13 1.28 (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 12 1.27 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 25 1.26 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 18 1.25 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 18 1.25 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 18 1.25 (1,461) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 7 1.25 | |
| (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 12 1.27 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1589) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:67:ARG:HE 25 1.26 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 18 1.25 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 18 1.25 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 18 1.25 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 7 1.25 | |
| (1,1593) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 25 1.26 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 18 1.25 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 18 1.25 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 18 1.25 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 7 1.25 | |
| (1,1593) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 25 1.26 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 18 1.25 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 18 1.25 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 18 1.25 (1,461) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 7 1.25 | |
| (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HA 14 1.26 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 25 1.26 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 18 1.25 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 18 1.25 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 18 1.25 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 7 1.25 | |
| (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 25 1.26 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 18 1.25 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 18 1.25 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 18 1.25 (1,461) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 7 1.25 | |
| (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 18 1.25 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 18 1.25 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 18 1.25 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 7 1.25 | |
| (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 18 1.25 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 18 1.25 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 7 1.25 | |
| (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 18 1.25 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 7 1.25 | |
| (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 7 1.25 | |
| | |
| (1,1593) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HA 3 1.23 | |
| | - |
| (1,1593) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HA 3 1.23 | |
| (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HA 3 1.23 | |
| (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 23 1.22 | |
| (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 23 1.22 | |
| (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 23 1.22 | |
| (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 6 1.21 | |
| (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 30 1.2 | |
| (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 30 1.2 | |
| (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 30 1.2 | |
| (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 20 1.19 | |
| (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 2 1.19 | |
| (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 2 1.19 | |
| (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 2 1.19 | |
| (1,1593) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HA 24 1.19 | |
| (1,1593) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HA 24 1.19 | |
| (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HA 24 1.19 | |
| (1,779) 1:A:52:HIS:HB2 1:A:6:GLN:HE21 13 1.18 | |
| (1,1638) 1:A:57:PRO:HB3 1:A:59:ARG:HB2 13 1.18 | |
| (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 5 1.18 | |
| (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 1 1.17 | |
| (1,1302) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:31:LEU:HB3 28 1.17 | |
| (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 22 1.17 | |
| (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 8 1.16 | |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|-----------------|
| (1,1589) | 1:A:20:ARG:HG3 | 1:A:67:ARG:HE | 29 | 1.15 |
| (1,1271) | 1:A:62:ARG:HA | 1:A:58:ILE:HG12 | 16 | 1.15 |
| (1,1638) | 1:A:57:PRO:HB3 | 1:A:59:ARG:HB2 | 1 | 1.14 |
| (1,1200) | 1:A:56:LEU:HD21 | 1:A:55:VAL:H | 14 | 1.14 |
| (1,1200) | 1:A:56:LEU:HD22 | 1:A:55:VAL:H | 14 | 1.14 |
| (1,1200) | 1:A:56:LEU:HD23 | 1:A:55:VAL:H | 14 | 1.14 |
| (1,444) | 1:A:47:ILE:HA | 1:A:50:ARG:HB3 | 25 | 1.13 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:29:SER:HA | 13 | 1.13 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:29:SER:HA | 13 | 1.13 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:29:SER:HA | 13 | 1.13 |
| (1,1122) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:52:HIS:HB3 | 2 | 1.13 |
| (1,1122) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:52:HIS:HB3 | 2 | 1.13 |
| (1,1122) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:52:HIS:HB3 | 2 | 1.13 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD2 | 1 | 1.11 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD3 | 1 | 1.11 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 1 | 1.11 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 1 | 1.11 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD2 | 1 | 1.11 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD3 | 1 | 1.11 |
| (1,1271) | 1:A:62:ARG:HA | 1:A:58:ILE:HG12 | 15 | 1.11 |
| (1,1271) | 1:A:62:ARG:HA | 1:A:58:ILE:HG12 | 21 | 1.11 |
| (1,1271) | 1:A:62:ARG:HA | 1:A:58:ILE:HG12 | 1 | 1.1 |
| (1,1271) | 1:A:62:ARG:HA | 1:A:58:ILE:HG12 | 6 | 1.1 |
| (1,1638) | 1:A:57:PRO:HB3 | 1:A:59:ARG:HB2 | 20 | 1.09 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD21 | 14 | 1.09 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD22 | 14 | 1.09 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD23 | 14 | 1.09 |
| (1,197) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HB3 | 27 | 1.08 |
| (1,1271) | 1:A:62:ARG:HA | 1:A:58:ILE:HG12 | 20 | 1.08 |
| (1,778) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:6:GLN:HE21 | 10 | 1.07 |
| (1,1099) | 1:A:40:MET:HG3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 28 | 1.07 |
| (1,1099) | 1:A:40:MET:HG3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 28 | 1.07 |
| (1,1099) | 1:A:40:MET:HG3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 28 | 1.07 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:29:SER:HA | 26 | 1.06 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:29:SER:HA | 26 | 1.06 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:29:SER:HA | 26 | 1.06 |
| (1,1589) | 1:A:20:ARG:HG3 | 1:A:67:ARG:HE | 1 | 1.06 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD11 | 30 | 1.05 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD12 | 30 | 1.05 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD13 | 30 | 1.05 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 28 | 1.05 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 28 | 1.05 |
| () / | : - = - 5 | | | od on mort mage |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 28 | 1.05 |
| (1,1589) | 1:A:20:ARG:HG3 | 1:A:67:ARG:HE | 14 | 1.05 |
| (1,1555) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB3 | 3 | 1.05 |
| (1,1555) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB3 | 3 | 1.05 |
| (1,1555) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB3 | 3 | 1.05 |
| (1,1271) | 1:A:62:ARG:HA | 1:A:58:ILE:HG12 | 3 | 1.05 |
| (1,1271) | 1:A:62:ARG:HA | 1:A:58:ILE:HG12 | 13 | 1.05 |
| (1,1271) | 1:A:62:ARG:HA | 1:A:58:ILE:HG12 | 23 | 1.05 |
| (1,778) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:6:GLN:HE21 | 11 | 1.04 |
| (1,72) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:6:GLN:HE21 | 13 | 1.04 |
| (1,72) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:6:GLN:HE21 | 13 | 1.04 |
| (1,72) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:6:GLN:HE21 | 13 | 1.04 |
| (1,72) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:6:GLN:HE21 | 13 | 1.04 |
| (1,72) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:6:GLN:HE21 | 13 | 1.04 |
| (1,72) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:6:GLN:HE21 | 13 | 1.04 |
| (1,1642) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:6:GLN:HE21 | 25 | 1.04 |
| (1,1642) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:6:GLN:HE21 | 25 | 1.04 |
| (1,1642) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:6:GLN:HE21 | 25 | 1.04 |
| (1,778) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:6:GLN:HE21 | 28 | 1.03 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:62:ARG:HG3 | 20 | 1.03 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:62:ARG:HG3 | 20 | 1.03 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:62:ARG:HG3 | 20 | 1.03 |
| (1,1544) | 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:44:VAL:H | 18 | 1.03 |
| (1,1544) | 1:A:44:VAL:HG22 | 1:A:44:VAL:H | 18 | 1.03 |
| (1,1544) | 1:A:44:VAL:HG23 | 1:A:44:VAL:H | 18 | 1.03 |
| (1,1509) | 1:A:72:MET:HG2 | 1:A:9:LEU:HD11 | 13 | 1.02 |
| (1,1509) | 1:A:72:MET:HG2 | 1:A:9:LEU:HD12 | 13 | 1.02 |
| (1,1509) | 1:A:72:MET:HG2 | 1:A:9:LEU:HD13 | 13 | 1.02 |
| (1,1302) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:31:LEU:HB3 | 7 | 1.02 |
| (1,1271) | 1:A:62:ARG:HA | 1:A:58:ILE:HG12 | 8 | 1.02 |
| (1,1271) | 1:A:62:ARG:HA | 1:A:58:ILE:HG12 | 17 | 1.02 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:29:SER:HA | 29 | 1.01 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:29:SER:HA | 29 | 1.01 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:29:SER:HA | 29 | 1.01 |
| (1,778) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:6:GLN:HE21 | 30 | 1.0 |
| (1,502) | 1:A:19:ILE:HD11 | 1:A:25:ILE:HG13 | 22 | 1.0 |
| (1,502) | 1:A:19:ILE:HD12 | 1:A:25:ILE:HG13 | 22 | 1.0 |
| (1,502) | 1:A:19:ILE:HD13 | 1:A:25:ILE:HG13 | 22 | 1.0 |
| (1,1271) | 1:A:62:ARG:HA | 1:A:58:ILE:HG12 | 4 | 1.0 |
| (1,928) | 1:A:57:PRO:HG2 | 1:A:56:LEU:HD21 | 14 | 0.98 |
| (1,928) | 1:A:57:PRO:HG2 | 1:A:56:LEU:HD22 | 14 | 0.98 |
| (1,928) | 1:A:57:PRO:HG2 | 1:A:56:LEU:HD23 | 14 | 0.98 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,845) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HB2 | 6 | 0.97 |
| (1,845) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HB3 | 6 | 0.97 |
| (1,779) | 1:A:52:HIS:HB2 | 1:A:6:GLN:HE21 | 18 | 0.97 |
| (1,236) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:66:LEU:H | 19 | 0.97 |
| (1,236) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:66:LEU:H | 19 | 0.97 |
| (1,236) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:66:LEU:H | 19 | 0.97 |
| (1,1271) | 1:A:62:ARG:HA | 1:A:58:ILE:HG12 | 30 | 0.97 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD11 | 22 | 0.96 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD12 | 22 | 0.96 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD13 | 22 | 0.96 |
| (1,1638) | 1:A:57:PRO:HB3 | 1:A:59:ARG:HB2 | 22 | 0.96 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD11 | 5 | 0.95 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD12 | 5 | 0.95 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD13 | 5 | 0.95 |
| (1,1302) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:31:LEU:HB3 | 22 | 0.95 |
| (1,1196) | 1:A:56:LEU:HD21 | 1:A:56:LEU:HA | 14 | 0.95 |
| (1,1196) | 1:A:56:LEU:HD22 | 1:A:56:LEU:HA | 14 | 0.95 |
| (1,1196) | 1:A:56:LEU:HD23 | 1:A:56:LEU:HA | 14 | 0.95 |
| (1,111) | 1:A:55:VAL:HG21 | 1:A:49:GLU:HG3 | 18 | 0.95 |
| (1,111) | 1:A:55:VAL:HG22 | 1:A:49:GLU:HG3 | 18 | 0.95 |
| (1,111) | 1:A:55:VAL:HG23 | 1:A:49:GLU:HG3 | 18 | 0.95 |
| (1,1065) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:38:SER:H | 5 | 0.95 |
| (1,1065) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:38:SER:H | 5 | 0.95 |
| (1,1065) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:38:SER:H | 5 | 0.95 |
| (1,928) | 1:A:57:PRO:HG2 | 1:A:56:LEU:HD21 | 20 | 0.94 |
| (1,928) | 1:A:57:PRO:HG2 | 1:A:56:LEU:HD22 | 20 | 0.94 |
| (1,928) | 1:A:57:PRO:HG2 | 1:A:56:LEU:HD23 | 20 | 0.94 |
| (1,778) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:6:GLN:HE21 | 15 | 0.94 |
| (1,1648) | 1:A:74:SER:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 18 | 0.94 |
| (1,1648) | 1:A:74:SER:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 18 | 0.94 |
| (1,1648) | 1:A:74:SER:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 18 | 0.94 |
| (1,1638) | 1:A:57:PRO:HB3 | 1:A:59:ARG:HB2 | 15 | 0.94 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:74:SER:HB2 | 19 | 0.93 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:74:SER:HB2 | 19 | 0.93 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:74:SER:HB2 | 19 | 0.93 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:31:LEU:HA | 19 | 0.93 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:31:LEU:HA | 19 | 0.93 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:31:LEU:HA | 19 | 0.93 |
| (1,1638) | 1:A:57:PRO:HB3 | 1:A:59:ARG:HB2 | 23 | 0.93 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB2 | 3 | 0.93 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB2 | 3 | 0.93 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB2 | 3 | 0.93 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:62:ARG:HG3 | 8 | 0.91 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:62:ARG:HG3 | 8 | 0.91 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:62:ARG:HG3 | 8 | 0.91 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:29:SER:HA | 27 | 0.91 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:29:SER:HA | 27 | 0.91 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:29:SER:HA | 27 | 0.91 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:62:ARG:HG3 | 18 | 0.9 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:62:ARG:HG3 | 18 | 0.9 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:62:ARG:HG3 | 18 | 0.9 |
| (1,1369) | 1:A:71:GLU:HG2 | 1:A:72:MET:H | 3 | 0.9 |
| (1,1107) | 1:A:48:LEU:HA | 1:A:52:HIS:HB2 | 2 | 0.9 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB2 | 28 | 0.9 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB2 | 28 | 0.9 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB2 | 28 | 0.9 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 24 | 0.89 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 24 | 0.89 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 24 | 0.89 |
| (1,1592) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:30:SER:H | 3 | 0.89 |
| (1,1592) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:30:SER:H | 3 | 0.89 |
| (1,1592) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:30:SER:H | 3 | 0.89 |
| (1,1589) | 1:A:20:ARG:HG3 | 1:A:67:ARG:HE | 11 | 0.89 |
| (1,1302) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:31:LEU:HB3 | 19 | 0.89 |
| (1,1271) | 1:A:62:ARG:HA | 1:A:58:ILE:HG12 | 28 | 0.89 |
| (1,1099) | 1:A:40:MET:HG3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 24 | 0.89 |
| (1,1099) | 1:A:40:MET:HG3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 24 | 0.89 |
| (1,1099) | 1:A:40:MET:HG3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 24 | 0.89 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:9:LEU:HD21 | 24 | 0.88 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:9:LEU:HD22 | 24 | 0.88 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:9:LEU:HD23 | 24 | 0.88 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:48:LEU:HD11 | 24 | 0.88 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:48:LEU:HD12 | 24 | 0.88 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:48:LEU:HD13 | 24 | 0.88 |
| (1,1126) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:52:HIS:H | 2 | 0.87 |
| (1,1126) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:52:HIS:H | 2 | 0.87 |
| (1,1126) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:52:HIS:H | 2 | 0.87 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD11 | 16 | 0.86 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD12 | 16 | 0.86 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD13 | 16 | 0.86 |
| (1,700) | 1:A:59:ARG:HA | 1:A:62:ARG:HD2 | 28 | 0.86 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HG | 15 | 0.86 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HG | 15 | 0.86 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HG | 15 | 0.86 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HG | 17 | 0.86 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HG | 17 | 0.86 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HG | 17 | 0.86 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HG | 19 | 0.86 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HG | 19 | 0.86 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HG | 19 | 0.86 |
| (1,229) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD21 | 5 | 0.86 |
| (1,229) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD22 | 5 | 0.86 |
| (1,229) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD23 | 5 | 0.86 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:70:GLN:HE21 | 14 | 0.85 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:70:GLN:HE21 | 14 | 0.85 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:70:GLN:HE21 | 14 | 0.85 |
| (1,719) | 1:A:63:GLN:HB2 | 1:A:63:GLN:HE21 | 29 | 0.85 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HG | 13 | 0.85 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HG | 13 | 0.85 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HG | 13 | 0.85 |
| (1,102) | 1:A:55:VAL:HG21 | 1:A:55:VAL:H | 1 | 0.85 |
| (1,102) | 1:A:55:VAL:HG22 | 1:A:55:VAL:H | 1 | 0.85 |
| (1,102) | 1:A:55:VAL:HG23 | 1:A:55:VAL:H | 1 | 0.85 |
| (1,719) | 1:A:63:GLN:HB2 | 1:A:63:GLN:HE21 | 24 | 0.84 |
| (1,1117) | 1:A:48:LEU:HA | 1:A:48:LEU:HD11 | 22 | 0.84 |
| (1,1117) | 1:A:48:LEU:HA | 1:A:48:LEU:HD12 | 22 | 0.84 |
| (1,1117) | 1:A:48:LEU:HA | 1:A:48:LEU:HD13 | 22 | 0.84 |
| (1,1012) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:31:LEU:H | 5 | 0.84 |
| (1,1012) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:31:LEU:H | 5 | 0.84 |
| (1,1012) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:31:LEU:H | 5 | 0.84 |
| (1,719) | 1:A:63:GLN:HB2 | 1:A:63:GLN:HE21 | 10 | 0.83 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HG | 5 | 0.83 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HG | 5 | 0.83 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HG | 5 | 0.83 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HG | 16 | 0.83 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HG | 16 | 0.83 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HG | 16 | 0.83 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:62:ARG:HG3 | 6 | 0.83 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:62:ARG:HG3 | 6 | 0.83 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:62:ARG:HG3 | 6 | 0.83 |
| (1,1638) | 1:A:57:PRO:HB3 | 1:A:59:ARG:HB2 | 30 | 0.83 |
| (1,1117) | 1:A:48:LEU:HA | 1:A:48:LEU:HD11 | 2 | 0.83 |
| (1,1117) | 1:A:48:LEU:HA | 1:A:48:LEU:HD12 | 2 | 0.83 |
| (1,1117) | 1:A:48:LEU:HA | 1:A:48:LEU:HD13 | 2 | 0.83 |
| (1,1117) | 1:A:48:LEU:HA | 1:A:48:LEU:HD11 | 18 | 0.83 |
| (1,1117) | 1:A:48:LEU:HA | 1:A:48:LEU:HD12 | 18 | 0.83 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1117) | 1:A:48:LEU:HA | 1:A:48:LEU:HD13 | 18 | 0.83 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD11 | 1:A:43:GLU:HG2 | 21 | 0.82 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD12 | 1:A:43:GLU:HG2 | 21 | 0.82 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD13 | 1:A:43:GLU:HG2 | 21 | 0.82 |
| (1,1271) | 1:A:62:ARG:HA | 1:A:58:ILE:HG12 | 24 | 0.82 |
| (1,719) | 1:A:63:GLN:HB2 | 1:A:63:GLN:HE21 | 5 | 0.81 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HG | 30 | 0.81 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HG | 30 | 0.81 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HG | 30 | 0.81 |
| (1,1302) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:31:LEU:HB3 | 18 | 0.81 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:74:SER:HB2 | 24 | 0.8 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:74:SER:HB2 | 24 | 0.8 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:74:SER:HB2 | 24 | 0.8 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:31:LEU:HA | 24 | 0.8 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:31:LEU:HA | 24 | 0.8 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:31:LEU:HA | 24 | 0.8 |
| (1,233) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:31:LEU:HA | 30 | 0.8 |
| (1,233) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:31:LEU:HA | 30 | 0.8 |
| (1,233) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:31:LEU:HA | 30 | 0.8 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:29:SER:HA | 17 | 0.8 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:29:SER:HA | 17 | 0.8 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:29:SER:HA | 17 | 0.8 |
| (1,1592) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:30:SER:H | 24 | 0.8 |
| (1,1592) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:30:SER:H | 24 | 0.8 |
| (1,1592) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:30:SER:H | 24 | 0.8 |
| (1,1589) | 1:A:20:ARG:HG3 | 1:A:67:ARG:HE | 13 | 0.8 |
| (1,1555) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB3 | 20 | 0.8 |
| (1,1555) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB3 | 20 | 0.8 |
| (1,1555) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB3 | 20 | 0.8 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:26:ASN:HB3 | 13 | 0.8 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:26:ASN:HB3 | 13 | 0.8 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:26:ASN:HB3 | 13 | 0.8 |
| (1,1327) | 1:A:68:LYS:HD2 | 1:A:71:GLU:HB2 | 24 | 0.8 |
| (1,1327) | 1:A:68:LYS:HD3 | 1:A:71:GLU:HB2 | 24 | 0.8 |
| (1,927) | 1:A:57:PRO:HG3 | 1:A:56:LEU:HD21 | 14 | 0.79 |
| (1,927) | 1:A:57:PRO:HG3 | 1:A:56:LEU:HD22 | 14 | 0.79 |
| (1,927) | 1:A:57:PRO:HG3 | 1:A:56:LEU:HD23 | 14 | 0.79 |
| (1,719) | 1:A:63:GLN:HB2 | 1:A:63:GLN:HE21 | 30 | 0.79 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:62:ARG:HG3 | 21 | 0.79 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:62:ARG:HG3 | 21 | 0.79 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:62:ARG:HG3 | 21 | 0.79 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:70:GLN:HE21 | 17 | 0.78 |



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

| (1,972) | Atom-1 | $\mathbf{Atom}	extbf{-2}$ | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|---------------------------|-------|---------------|
| (1,314) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:70:GLN:HE21 | 17 | 0.78 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:70:GLN:HE21 | 17 | 0.78 |
| (1,779) | 1:A:52:HIS:HB2 | 1:A:6:GLN:HE21 | 30 | 0.78 |
| (1,700) | 1:A:59:ARG:HA | 1:A:62:ARG:HD2 | 19 | 0.78 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:9:LEU:HD21 | 13 | 0.78 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:9:LEU:HD22 | 13 | 0.78 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:9:LEU:HD23 | 13 | 0.78 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:48:LEU:HD11 | 13 | 0.78 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:48:LEU:HD12 | 13 | 0.78 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:48:LEU:HD13 | 13 | 0.78 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD11 | 15 | 0.77 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD12 | 15 | 0.77 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD13 | 15 | 0.77 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD11 | 19 | 0.77 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD12 | 19 | 0.77 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD13 | 19 | 0.77 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:74:SER:HB2 | 26 | 0.77 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:74:SER:HB2 | 26 | 0.77 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:74:SER:HB2 | 26 | 0.77 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:31:LEU:HA | 26 | 0.77 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:31:LEU:HA | 26 | 0.77 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:31:LEU:HA | 26 | 0.77 |
| (1,233) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:31:LEU:HA | 5 | 0.77 |
| (1,233) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:31:LEU:HA | 5 | 0.77 |
| (1,233) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:31:LEU:HA | 5 | 0.77 |
| (1,233) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:31:LEU:HA | 15 | 0.77 |
| (1,233) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:31:LEU:HA | 15 | 0.77 |
| (1,233) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:31:LEU:HA | 15 | 0.77 |
| (1,1642) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:6:GLN:HE21 | 11 | 0.77 |
| (1,1642) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:6:GLN:HE21 | 11 | 0.77 |
| (1,1642) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:6:GLN:HE21 | 11 | 0.77 |
| (1,1302) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:31:LEU:HB3 | 15 | 0.77 |
| (1,572) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:44:VAL:HG21 | 18 | 0.76 |
| (1,572) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:44:VAL:HG22 | 18 | 0.76 |
| (1,572) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:44:VAL:HG23 | 18 | 0.76 |
| (1,412) | 1:A:45:ARG:HD2 | 1:A:58:ILE:HA | 11 | 0.76 |
| (1,412) | 1:A:45:ARG:HD3 | 1:A:58:ILE:HA | 11 | 0.76 |
| (1,412) | 1:A:45:ARG:HD2 | 1:A:58:ILE:HA | 30 | 0.76 |
| (1,412) | 1:A:45:ARG:HD3 | 1:A:58:ILE:HA | 30 | 0.76 |
| (1,233) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:31:LEU:HA | 13 | 0.76 |
| (1,233) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:31:LEU:HA | 13 | 0.76 |
| (1,233) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:31:LEU:HA | 13 | 0.76 |



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

| (1,233) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:31:LEU:HA 16 0.76 (1,233) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:31:LEU:HA 16 0.76 (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 16 0.76 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 2 0.76 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 8 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 8 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,972) 1:A:32:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,972) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD3 1 | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|--|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 16 0.76 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 2 0.76 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 8 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 8 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,972) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:64:LEU:H 13 0.75 (1,972) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:64:LEU:H 13 0.75 (1,972) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:64:LEU:H 13 0.75 (1,972) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:64:LEU:H 13 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:64:LEU:H 13 0.75 (1,160) 1:A:64:LEU:HD3 1:A:64:LEU:H <td>(1,233)</td> <td>1:A:31:LEU:HD11</td> <td>1:A:31:LEU:HA</td> <td>16</td> <td>0.76</td> | (1,233) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:31:LEU:HA | 16 | 0.76 |
| (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 2 0.76 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 8 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 8 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 8 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,972) 1:A:4:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,972) 1:A:4:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,156) 1:A:6:ARD:HE21 | (1,233) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:31:LEU:HA | 16 | 0.76 |
| (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 8 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 8 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 8 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,972) 1:A:4:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,972) 1:A:6:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,972) 1:A:6:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,156) 1:A:6:ARE:HD23 1:A:72:MET:HB3 0.75 (1,156) 1:A:6:ARE:HB21 13 | (1,233) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:31:LEU:HA | 16 | 0.76 |
| (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 8 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 8 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,972) 1:A:427:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,972) 1:A:427:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:64:LEU:H 13 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:64:LEU:H 13 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:64:LEU:H 13 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:64:LEU:H 13 0.75 (1,1369) 1:A:71:GLU:HG2 1:A:72:MET:H 27 0.75 (1,1271) 1:A:63:GLN:HB2 1:A:63:GLN:HB21 15 0.74 (1,264) 1:A:33:A:LEU:HB2 1:A | (1,1589) | 1:A:20:ARG:HG3 | 1:A:67:ARG:HE | 2 | 0.76 |
| (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 8 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,972) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:64:LEU:H 13 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:64:LEU:H 13 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:64:LEU:H 13 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:64:LEU:H 13 0.75 (1,1369) 1:A:71:GLU:HG2 1:A:72:MET:H 27 0.75 (1,1369) 1:A:71:GLU:HG2 1:A:72:MET:H 27 0.75 (1,171) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 12 0.75 (1,171) 1:A:63:GLN:HB2 1:A:63:GLN:HE21 15 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:33:LEU:HD11 28 0.74 (1,264) 1:A:31:LE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 | (1,972) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:70:GLN:HE21 | 8 | 0.75 |
| (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:64:LEU:H 13 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:64:LEU:H 13 0.75 (1,1369) 1:A:71:GLU:HG2 1:A:72:MET:H 27 0.75 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 12 0.75 (1,719) 1:A:63:GLN:HB2 1:A:63:GLN:HE21 15 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 28 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 28 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:AR | (1,972) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:70:GLN:HE21 | 8 | 0.75 |
| (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:64:LEU:H 13 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:64:LEU:H 13 0.75 (1,1369) 1:A:71:GLU:HG2 1:A:72:MET:H 27 0.75 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 12 0.75 (1,719) 1:A:63:GLN:HB2 1:A:63:GLN:HE21 15 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 28 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 28 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 28 0.74 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:AR | (1,972) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:70:GLN:HE21 | 8 | 0.75 |
| (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 19 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:64:LEU:H 13 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:64:LEU:H 13 0.75 (1,1369) 1:A:71:GLU:HG2 1:A:72:MET:H 27 0.75 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 12 0.75 (1,719) 1:A:63:GLN:HB2 1:A:63:GLN:HE21 15 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 28 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 28 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:31:LEU: | (1,972) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:70:GLN:HE21 | 19 | 0.75 |
| (1,1566) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:64:LEU:H 13 0.75 (1,1566) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:64:LEU:H 13 0.75 (1,1369) 1:A:71:GLU:HG2 1:A:72:MET:H 27 0.75 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 12 0.75 (1,719) 1:A:63:GLN:HB2 1:A:63:GLN:HE21 15 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 28 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 28 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 28 0.74 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,394) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:31:LEU:H | (1,972) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:70:GLN:HE21 | 19 | 0.75 |
| (1,1566) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:64:LEU:H 13 0.75 (1,1369) 1:A:71:GLU:HG2 1:A:72:MET:H 27 0.75 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 12 0.75 (1,719) 1:A:63:GLN:HB2 1:A:63:GLN:HE21 15 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 28 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 28 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 28 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 28 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 2 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:31:LEU:H | (1,972) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:70:GLN:HE21 | 19 | 0.75 |
| (1,1369) 1:A:71:GLU:HG2 1:A:72:MET:H 27 0.75 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 12 0.75 (1,719) 1:A:63:GLN:HB2 1:A:63:GLN:HE21 15 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 28 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 28 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 28 0.74 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31:LE | (1,1566) | 1:A:68:LYS:HD2 | 1:A:64:LEU:H | 13 | 0.75 |
| (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 12 0.75 (1,719) 1:A:63:GLN:HB2 1:A:63:GLN:HE21 15 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 28 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 28 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 28 0.74 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31: | (1,1566) | 1:A:68:LYS:HD3 | 1:A:64:LEU:H | 13 | 0.75 |
| (1,719) 1:A:63:GLN:HB2 1:A:63:GLN:HE21 15 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 28 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 28 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 28 0.74 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,394) 1:A:31:LEU:HD23 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU | (1,1369) | 1:A:71:GLU:HG2 | 1:A:72:MET:H | 27 | 0.75 |
| (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 28 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 28 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 28 0.74 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,394) 1:A:31:LEU:HD23 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 6 0.73 | (1,1271) | 1:A:62:ARG:HA | 1:A:58:ILE:HG12 | 12 | 0.75 |
| (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 28 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 28 0.74 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,394) 1:A:31:LEU:HD23 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 6 0.73 | (1,719) | 1:A:63:GLN:HB2 | 1:A:63:GLN:HE21 | 15 | 0.74 |
| (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 28 0.74 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,394) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 6 0.73 | (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 28 | 0.74 |
| (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 6 0.73 | (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 28 | 0.74 |
| (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 6 0.73 | (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 28 | 0.74 |
| (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 2 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 6 0.73 | (1,394) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:25:ILE:HG13 | 2 | 0.73 |
| (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 6 0.73 | (1,394) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:25:ILE:HG13 | 2 | 0.73 |
| (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 6 0.73 | (1,394) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:25:ILE:HG13 | 2 | 0.73 |
| (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 23 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 6 0.73 | (1,239) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:62:ARG:HG3 | 23 | 0.73 |
| (1,233) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 6 0.73 | (1,239) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:62:ARG:HG3 | 23 | 0.73 |
| (1,233) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 6 0.73 | (1,239) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:62:ARG:HG3 | 23 | 0.73 |
| (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 17 0.73 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 6 0.73 | (1,233) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:31:LEU:HA | 17 | 0.73 |
| (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 6 0.73 | (1,233) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:31:LEU:HA | 17 | 0.73 |
| () / | (1,233) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:31:LEU:HA | 17 | 0.73 |
| (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD22 6 0.73 | (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:9:LEU:HD21 | 6 | 0.73 |
| | (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:9:LEU:HD22 | 6 | 0.73 |
| (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 6 0.73 | (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:9:LEU:HD23 | 6 | 0.73 |
| (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD11 6 0.73 | (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:48:LEU:HD11 | 6 | 0.73 |
| (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 6 0.73 | (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:48:LEU:HD12 | 6 | 0.73 |
| (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 6 0.73 | (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:48:LEU:HD13 | 6 | 0.73 |
| (1,1638) 1:A:57:PRO:HB3 1:A:59:ARG:HB2 16 0.73 | | 1:A:57:PRO:HB3 | 1:A:59:ARG:HB2 | 16 | 0.73 |
| (1,1555) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 29 0.73 | | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB3 | 29 | 0.73 |
| (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 29 0.73 | | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB3 | 29 | 0.73 |
| (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 29 0.73 | (1,1555) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB3 | 29 | 0.73 |
| (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 9 0.73 | (1,1271) | 1:A:62:ARG:HA | 1:A:58:ILE:HG12 | 9 | 0.73 |
| (1,1122) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB3 18 0.73 | (1,1122) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:52:HIS:HB3 | 18 | 0.73 |
| (1,1122) 1:A:48:LEU:HD12 1:A:52:HIS:HB3 18 0.73 | (1,1122) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:52:HIS:HB3 | 18 | 0.73 |
| (1,1122) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:52:HIS:HB3 18 0.73 | (1,1122) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:52:HIS:HB3 | 18 | 0.73 |
| (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 9 0.73 | (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB2 | 9 | 0.73 |



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

| (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 9 0.73 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 9 0.73 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 25 0.73 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 25 0.73 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 5 0.72 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 5 0.72 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 5 0.72 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 5 0.72 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 5 0.72 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:6:2ARG:HG3 3 0.72 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:6:Q:ARG:HG3 3 0.72 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:6:Q:A:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:6:Q:A:HE21 18 0.72 (1,1611) 1:A:5:S:VAL:HG21 1:A:49:G | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|--|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 25 0.73 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 25 0.73 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 25 0.73 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 5 0.72 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 5 0.72 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 3 0.72 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 3 0.72 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 3 0.72 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 3 0.72 (1,249) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,111) 1:A:5:S:VAL:HG21 1:A:4:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:5:S:VAL:HG21 1:A:49: | (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB2 | 9 | 0.73 |
| (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 25 0.73 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 25 0.73 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 5 0.72 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 5 0.72 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 5 0.72 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 5 0.72 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 3 0.72 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 3 0.72 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 3 0.72 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 3 0.72 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 3 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:35:VAL:HG22 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:35:VAL:HG22 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:SP:HB2 12 0.72 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB2 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,0020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,0020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,0020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,0020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HD2 | (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB2 | 9 | 0.73 |
| (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 25 0.73 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 5 0.72 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 5 0.72 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 5 0.72 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 3 0.72 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 3 0.72 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 3 0.72 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 3 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG22 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG22 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 20 0.71 (1,020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 20 0.71 (1,020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 20 0.71 (1,020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:46:LEU:H 11 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:46:ABC:HB21 17 0.7 (1,107) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:46:ABC:HB21 17 0.7 (1,107) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:46:ABC:HB21 17 0.7 (1,107) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:46:ABC:HB21 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:46:CLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:44:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY: | (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB2 | 25 | 0.73 |
| (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 5 0.72 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 5 0.72 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 5 0.72 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 3 0.72 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 3 0.72 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,111) 1:A:5:5:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:5:5:VAL:HG22 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,11020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64: | (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB2 | 25 | 0.73 |
| (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 5 0.72 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 5 0.72 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 3 0.72 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 3 0.72 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 3 0.72 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 3 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD14 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:39:GLU:HG3 2 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,0020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:LEU:HD11 1.7 0.7 (1,007) (1,007) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:46:GLN:HA 2 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:46:ARG:HG3 1 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:46:ARG:HG3 1 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:46:ARG:HG3 1 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD14 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD14 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:G | (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB2 | 25 | 0.73 |
| (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 5 0.72 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 3 0.72 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 3 0.72 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 3 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG22 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG22 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG23 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:LEU:HD11 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 17 0.7 (1,1020) 1:A:33:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 | (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 5 | 0.72 |
| (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 3 0.72 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 3 0.72 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 3 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG22 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG22 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:LEU:HD11 1.7 0.7 (1,668) 1:A:49:GLU:HD23 1:A:33:LEU:HD13 17 0.7 (1,170) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 1.7 0.7 (1,200) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:2 | (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 5 | 0.72 |
| (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 3 0.72 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 3 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG22 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG23 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 20 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 20 0.71 (1,301) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 17 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1: | (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 5 | 0.72 |
| (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 3 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG22 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG23 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,11020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB2 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 02 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 02 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:LEU:HD11 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 17 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,17 | (1,239) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:62:ARG:HG3 | 3 | 0.72 |
| (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG22 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG23 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG23 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:68:LYS:HB2 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:LEU:HD11 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 17 0.7 (1,39) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 | (1,239) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:62:ARG:HG3 | 3 | 0.72 |
| (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG22 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG23 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB2 1:A:64:LEU:H 1 0.71 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 1 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD123 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD123 1: | (1,239) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:62:ARG:HG3 | 3 | 0.72 |
| (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 18 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG22 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG23 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:LEU:HD11 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:46: | (1,1642) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:6:GLN:HE21 | 18 | 0.72 |
| (1,111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG22 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG23 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:LEU:HD11 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:46:GLN:HA 2 0.7 (1,801) 1:A:66:THR:HA 1:A:46:GL | (1,1642) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:6:GLN:HE21 | 18 | 0.72 |
| (1,111) 1:A:55:VAL:HG22 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,111) 1:A:55:VAL:HG23 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 17 0.7 (1,801) 1:A:31:LEU:HD13 17 | (1,1642) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:6:GLN:HE21 | 18 | 0.72 |
| (1,111) 1:A:55:VAL:HG23 1:A:49:GLU:HG3 2 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB2 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:36:GEN:HA 2 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG: | (1,111) | 1:A:55:VAL:HG21 | 1:A:49:GLU:HG3 | 2 | 0.72 |
| (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB2 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:46:GLN:HA 2 0.7 (1,801) 1:A:69:GLU:HG2 1:A:46:GLN:HA 2 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG: | (1,111) | 1:A:55:VAL:HG22 | 1:A:49:GLU:HG3 | 2 | 0.72 |
| (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB2 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 </td <td>(1,111)</td> <td>1:A:55:VAL:HG23</td> <td>1:A:49:GLU:HG3</td> <td>2</td> <td>0.72</td> | (1,111) | 1:A:55:VAL:HG23 | 1:A:49:GLU:HG3 | 2 | 0.72 |
| (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 12 0.72 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:46:GLN:HA 2 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:46:GLN:HA 2 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:46:GLN:HA 2 0.7 (1,801) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 | (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB2 | 12 | 0.72 |
| (1,1595) 1:A:68:LYS:HB2 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 17 0.7 (1,668) 1:A:49:GLU:HG2 1:A:46:GLN:HA 2 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 | (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB2 | 12 | 0.72 |
| (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 11 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 17 0.7 (1,668) 1:A:49:GLU:HG2 1:A:46:GLN:HA 2 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 | (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB2 | 12 | 0.72 |
| (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 17 0.7 (1,668) 1:A:49:GLU:HG2 1:A:46:GLN:HA 2 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:9:LEU:HD21 | (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 11 | 0.71 |
| (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 17 0.7 (1,668) 1:A:49:GLU:HG2 1:A:46:GLN:HA 2 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:9:LE | (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB3 | 1:A:64:LEU:H | 11 | 0.71 |
| (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 22 0.71 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 17 0.7 (1,668) 1:A:49:GLU:HG2 1:A:46:GLN:HA 2 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:9:LEU:HD21 1 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD2 | (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB2 | 22 | 0.71 |
| (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 17 0.7 (1,668) 1:A:49:GLU:HG2 1:A:46:GLN:HA 2 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 1 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 <t< td=""><td>(1,1020)</td><td>1:A:34:LEU:HD22</td><td>1:A:33:ASP:HB2</td><td>22</td><td>0.71</td></t<> | (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB2 | 22 | 0.71 |
| (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 17 0.7 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 17 0.7 (1,668) 1:A:49:GLU:HG2 1:A:46:GLN:HA 2 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 1 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 1 0.7 | (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB2 | 22 | 0.71 |
| (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 17 0.7 (1,668) 1:A:49:GLU:HG2 1:A:46:GLN:HA 2 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 1 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 1 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 1 0.7 | (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD11 | 17 | 0.7 |
| (1,668) 1:A:49:GLU:HG2 1:A:46:GLN:HA 2 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 1 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 1 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 1 0.7 | (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD12 | 17 | 0.7 |
| (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 1 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD22 1 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 1 0.7 | (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD13 | 17 | 0.7 |
| (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 1 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD22 1 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 1 0.7 | (1,668) | 1:A:49:GLU:HG2 | 1:A:46:GLN:HA | 2 | 0.7 |
| (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 1 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 1 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD22 1 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 1 0.7 | (1,239) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:62:ARG:HG3 | 1 | 0.7 |
| (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 1 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD22 1 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 1 0.7 | (1,239) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:62:ARG:HG3 | 1 | 0.7 |
| (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 1 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD22 1 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 1 0.7 | (1,239) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:62:ARG:HG3 | 1 | 0.7 |
| (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 1 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD22 1 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 1 0.7 | (1,177) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 8 | 0.7 |
| (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 8 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 1 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD22 1 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 1 0.7 | | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 8 | 0.7 |
| (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 1 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD22 1 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 1 0.7 | | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 8 | 0.7 |
| (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 17 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 1 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD22 1 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 1 0.7 | (1,177) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 17 | 0.7 |
| (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 1 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD22 1 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 1 0.7 | (1,177) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 17 | 0.7 |
| (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD22 1 0.7 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 1 0.7 | (1,177) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 17 | 0.7 |
| (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 1 0.7 | (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:9:LEU:HD21 | 1 | 0.7 |
| | | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:9:LEU:HD22 | 1 | 0.7 |
| | (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:9:LEU:HD23 | 1 | 0.7 |
| (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD11 1 0.7 | | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:48:LEU:HD11 | 1 | 0.7 |



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

| (1,17) | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|--|--|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1592) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:30:SER:H 13 0.7 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:30:SER:H 13 0.7 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:30:SER:H 13 0.7 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 1 0.7 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 1 0.7 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 7 0.69 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 7 0.69 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 7 0.69 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 7 0.69 (1,778) 1:A:35:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 7 0.69 (1,778) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 19 0.69 (1,233) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:33:LEU:HA 19 0.69 (1,233) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP: | (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:48:LEU:HD12 | 1 | 0.7 |
| (1,1592) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:30:SER:H 13 0.7 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:30:SER:H 13 0.7 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 1 0.7 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 1 0.7 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 7 0.69 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 7 0.69 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 7 0.69 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 7 0.69 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 18 0.69 (1,233) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:31:LEU:HA 19 0.69 (1,233) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:31:LEU:HA 19 0.69 (1,233) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:31:LEU:HA 19 0.69 (1,233) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 19 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 30 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 30 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 30 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 30 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 30 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 30 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 30 0.69 (1,1020) 1: | (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:48:LEU:HD13 | 1 | 0.7 |
| (1,1592) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:30:SER:H 13 0.7 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 1 0.7 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 1 0.7 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:30:ASP:HB2 1 0.7 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 7 0.69 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 7 0.69 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 7 0.69 (1,972) 1:A:32:HEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 18 0.69 (1,778) 1:A:32:HEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 19 0.69 (1,233) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:31:LEU:HA 19 0.69 (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 19 0.69 (1,233) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33: | (1,1592) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:30:SER:H | 13 | 0.7 |
| (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 1 0.7 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 1 0.7 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 7 0.69 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 7 0.69 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 7 0.69 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 7 0.69 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 18 0.69 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 18 0.69 (1,233) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:31:LEU:HA 19 0.69 (1,233) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:33:LEU:HA 19 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:33:LEU:HA 19 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A | (1,1592) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:30:SER:H | 13 | 0.7 |
| (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 1 0.7 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 1 0.7 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 7 0.69 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 7 0.69 (1,972) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6-GLN:HE21 7 0.69 (1,972) 1:A:31:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 7 0.69 (1,778) 1:A:32:HIS:HB3 1:A:6-GLN:HE21 18 0.69 (1,778) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:31:LEU:HA 19 0.69 (1,233) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:31:LEU:HA 19 0.69 (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 19 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33 | (1,1592) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:30:SER:H | 13 | 0.7 |
| (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:37:GLN:HE21 7 0.69 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 7 0.69 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 7 0.69 (1,972) 1:A:32:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 7 0.69 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 18 0.69 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 18 0.69 (1,233) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:31:LEU:HA 19 0.69 (1,233) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 <t< td=""><td>(1,1020)</td><td>1:A:34:LEU:HD21</td><td>1:A:33:ASP:HB2</td><td>1</td><td>0.7</td></t<> | (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB2 | 1 | 0.7 |
| (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 7 0.69 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 7 0.69 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 7 0.69 (1,972) 1:A:32:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 7 0.69 (1,783) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:31:LEU:HA 19 0.69 (1,233) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:31:LEU:HA 19 0.69 (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 19 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 <t< td=""><td>(1,1020)</td><td>1:A:34:LEU:HD22</td><td>1:A:33:ASP:HB2</td><td>1</td><td>0.7</td></t<> | (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB2 | 1 | 0.7 |
| (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 7 0.69 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 7 0.69 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 18 0.69 (1,233) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:31:LEU:HA 19 0.69 (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 19 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,170) 1:A:72:MET:HB3 <t< td=""><td>(1,1020)</td><td>1:A:34:LEU:HD23</td><td>1:A:33:ASP:HB2</td><td>1</td><td>0.7</td></t<> | (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB2 | 1 | 0.7 |
| (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 7 0.69 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 18 0.69 (1,233) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:31:LEU:HA 19 0.69 (1,233) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:31:LEU:HA 19 0.69 (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:33:LEU:HA 19 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 < | (1,972) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:70:GLN:HE21 | 7 | 0.69 |
| (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 18 0.69 (1,233) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:31:LEU:HA 19 0.69 (1,233) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:31:LEU:HA 19 0.69 (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 19 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 | (1,972) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:70:GLN:HE21 | 7 | 0.69 |
| (1,233) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:31:LEU:HA 19 0.69 (1,233) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:31:LEU:HA 19 0.69 (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 19 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 | (1,972) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:70:GLN:HE21 | 7 | 0.69 |
| (1,233) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:31:LEU:HA 19 0.69 (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 19 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A | (1,778) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:6:GLN:HE21 | 18 | 0.69 |
| (1,233) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:31:LEU:HA 19 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A: | (1,233) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:31:LEU:HA | 19 | 0.69 |
| (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,170) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 8 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD21 | (1,233) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:31:LEU:HA | 19 | 0.69 |
| (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,17) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:39:LEU:HD21 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 8 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 <t< td=""><td>(1,233)</td><td>1:A:31:LEU:HD13</td><td>1:A:31:LEU:HA</td><td>19</td><td>0.69</td></t<> | (1,233) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:31:LEU:HA | 19 | 0.69 |
| (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 11 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,17) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:39:LEU:HD21 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 8 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD21 | (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB2 | 11 | 0.69 |
| (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,17) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,17) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,17) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:39:LEU:HD21 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 8 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:4 | (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB2 | 11 | 0.69 |
| (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD22 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD11 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 8 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,1566) 1:A:72:MET:HG2 1:A:68:LY | (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB2 | 11 | 0.69 |
| (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 21 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD22 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 8 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,566) 1:A:72:MET:HG2 1:A:68:LYS:HB3 11 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA | (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB2 | 21 | 0.69 |
| (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD22 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 8 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:68:LYS:HB2 11 0.67 (1,566) 1:A:72:MET:HG2 1:A:68:LYS:HB3 11 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:34:GLY:HA2 | (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB2 | 21 | 0.69 |
| (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD22 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD23 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD11 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 8 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,566) 1:A:72:MET:HG2 1:A:68:LYS:HB2 11 0.67 (1,566) 1:A:72:MET:HG2 1:A:68:LYS:HB3 11 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:30:SER:H | (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB2 | 21 | 0.69 |
| (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 23 0.69 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD22 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD11 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 8 0.68 (1,17) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:68:LYS:HB2 11 0.67 (1,566) 1:A:72:MET:HG2 1:A:68:LYS:HB3 11 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:30:SER:H | (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB2 | 23 | 0.69 |
| (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD22 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD11 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 8 0.68 (1,17) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,566) 1:A:72:MET:HG2 1:A:68:LYS:HB2 11 0.67 (1,566) 1:A:72:MET:HG2 1:A:68:LYS:HB3 11 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:30:SER:H | (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB2 | 23 | 0.69 |
| (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD22 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD11 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 8 0.68 (1,17) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:68:LYS:HB2 11 0.67 (1,566) 1:A:72:MET:HG2 1:A:68:LYS:HB3 11 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:30:SER:H | (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB2 | 23 | 0.69 |
| (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD11 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 8 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,566) 1:A:72:MET:HG2 1:A:68:LYS:HB2 11 0.67 (1,566) 1:A:72:MET:HG2 1:A:68:LYS:HB3 11 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:30:SER:H 14 0.67 | (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:9:LEU:HD21 | 8 | 0.68 |
| (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD11 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 8 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,566) 1:A:72:MET:HG2 1:A:68:LYS:HB2 11 0.67 (1,566) 1:A:72:MET:HG2 1:A:68:LYS:HB3 11 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,177) 1:A:32:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:30:SER:H 14 0.67 | (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:9:LEU:HD22 | 8 | 0.68 |
| (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 8 0.68 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 8 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,566) 1:A:72:MET:HG2 1:A:68:LYS:HB2 11 0.67 (1,566) 1:A:72:MET:HG2 1:A:68:LYS:HB3 11 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:30:SER:H 14 0.67 | (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:9:LEU:HD23 | 8 | 0.68 |
| (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 8 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:68:LYS:HB2 11 0.67 (1,566) 1:A:72:MET:HG2 1:A:68:LYS:HB3 11 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:30:SER:H 14 0.67 | (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:48:LEU:HD11 | 8 | 0.68 |
| (1,1593) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,566) 1:A:72:MET:HG2 1:A:68:LYS:HB2 11 0.67 (1,566) 1:A:72:MET:HG2 1:A:68:LYS:HB3 11 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:30:SER:H 14 0.67 | (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:48:LEU:HD12 | 8 | 0.68 |
| (1,1593) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,566) 1:A:72:MET:HG2 1:A:68:LYS:HB2 11 0.67 (1,566) 1:A:72:MET:HG2 1:A:68:LYS:HB3 11 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:30:SER:H 14 0.67 | (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:48:LEU:HD13 | 8 | 0.68 |
| (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,566) 1:A:72:MET:HG2 1:A:68:LYS:HB2 11 0.67 (1,566) 1:A:72:MET:HG2 1:A:68:LYS:HB3 11 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:30:SER:H 14 0.67 | (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:29:SER:HA | 19 | 0.68 |
| (1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HA 19 0.68 (1,566) 1:A:72:MET:HG2 1:A:68:LYS:HB2 11 0.67 (1,566) 1:A:72:MET:HG2 1:A:68:LYS:HB3 11 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:30:SER:H 14 0.67 | (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:29:SER:HA | 19 | 0.68 |
| (1,566) 1:A:72:MET:HG2 1:A:68:LYS:HB3 11 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:30:SER:H 14 0.67 | | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:29:SER:HA | 19 | 0.68 |
| (1,566) 1:A:72:MET:HG2 1:A:68:LYS:HB3 11 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:30:SER:H 14 0.67 | · · / | 1:A:72:MET:HG2 | 1:A:68:LYS:HB2 | 11 | 0.67 |
| (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:30:SER:H 14 0.67 | | 1:A:72:MET:HG2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 11 | 0.67 |
| (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:30:SER:H 14 0.67 | - : - : - : - : - : - : - : - : - : - : | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 7 | 0.67 |
| (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 7 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:30:SER:H 14 0.67 | | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 7 | 0.67 |
| (1,1592) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:30:SER:H 14 0.67 | | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 7 | 0.67 |
| (1,1592) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:30:SER:H 14 0.67 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:30:SER:H 14 0.67 | · · / | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:30:SER:H | 14 | |
| (1,1592) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:30:SER:H 14 0.67 | · · / | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:30:SER:H | 14 | 0.67 |
| | · · / | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:30:SER:H | 14 | |
| (1,1200) $1.A.00.GEU.HD0$ $1.A.00.EEU.HD2$ 10 0.01 | (1,1239) | 1:A:60:GLU:HB3 | 1:A:56:LEU:HB2 | 10 | 0.67 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1012) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:31:LEU:H | 28 | 0.67 |
| (1,1012) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:31:LEU:H | 28 | 0.67 |
| (1,1012) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:31:LEU:H | 28 | 0.67 |
| (1,845) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HB2 | 25 | 0.66 |
| (1,845) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HB3 | 25 | 0.66 |
| (1,779) | 1:A:52:HIS:HB2 | 1:A:6:GLN:HE21 | 5 | 0.66 |
| (1,412) | 1:A:45:ARG:HD2 | 1:A:58:ILE:HA | 28 | 0.66 |
| (1,412) | 1:A:45:ARG:HD3 | 1:A:58:ILE:HA | 28 | 0.66 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 27 | 0.66 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 27 | 0.66 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 27 | 0.66 |
| (1,1589) | 1:A:20:ARG:HG3 | 1:A:67:ARG:HE | 26 | 0.66 |
| (1,1509) | 1:A:72:MET:HG2 | 1:A:9:LEU:HD11 | 6 | 0.66 |
| (1,1509) | 1:A:72:MET:HG2 | 1:A:9:LEU:HD12 | 6 | 0.66 |
| (1,1509) | 1:A:72:MET:HG2 | 1:A:9:LEU:HD13 | 6 | 0.66 |
| (1,111) | 1:A:55:VAL:HG21 | 1:A:49:GLU:HG3 | 29 | 0.66 |
| (1,111) | 1:A:55:VAL:HG22 | 1:A:49:GLU:HG3 | 29 | 0.66 |
| (1,111) | 1:A:55:VAL:HG23 | 1:A:49:GLU:HG3 | 29 | 0.66 |
| (1,778) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:6:GLN:HE21 | 5 | 0.65 |
| (1,412) | 1:A:45:ARG:HD2 | 1:A:58:ILE:HA | 16 | 0.65 |
| (1,412) | 1:A:45:ARG:HD3 | 1:A:58:ILE:HA | 16 | 0.65 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 21 | 0.65 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB3 | 1:A:64:LEU:H | 21 | 0.65 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:47:ILE:HG13 | 18 | 0.65 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:47:ILE:HG13 | 18 | 0.65 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:47:ILE:HG13 | 18 | 0.65 |
| (1,1271) | 1:A:62:ARG:HA | 1:A:58:ILE:HG12 | 19 | 0.65 |
| (1,1248) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:62:ARG:HB3 | 6 | 0.65 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB2 | 7 | 0.65 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB2 | 7 | 0.65 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB2 | 7 | 0.65 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:74:SER:HB2 | 11 | 0.64 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:74:SER:HB2 | 11 | 0.64 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:74:SER:HB2 | 11 | 0.64 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:31:LEU:HA | 11 | 0.64 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:31:LEU:HA | 11 | 0.64 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:31:LEU:HA | 11 | 0.64 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD11 | 1:A:43:GLU:HG2 | 16 | 0.64 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD12 | 1:A:43:GLU:HG2 | 16 | 0.64 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD13 | 1:A:43:GLU:HG2 | 16 | 0.64 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB2 | 15 | 0.64 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB2 | 15 | 0.64 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB2 | 15 | 0.64 |
| (1,316) | 1:A:40:MET:HB2 | 1:A:39:LEU:HD21 | 28 | 0.63 |
| (1,316) | 1:A:40:MET:HB2 | 1:A:39:LEU:HD22 | 28 | 0.63 |
| (1,316) | 1:A:40:MET:HB2 | 1:A:39:LEU:HD23 | 28 | 0.63 |
| (1,240) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:34:LEU:HB2 | 15 | 0.63 |
| (1,240) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:34:LEU:HB2 | 15 | 0.63 |
| (1,240) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:34:LEU:HB2 | 15 | 0.63 |
| (1,240) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:34:LEU:HB2 | 19 | 0.63 |
| (1,240) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:34:LEU:HB2 | 19 | 0.63 |
| (1,240) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:34:LEU:HB2 | 19 | 0.63 |
| (1,1302) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:31:LEU:HB3 | 17 | 0.63 |
| (1,240) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:34:LEU:HB2 | 30 | 0.62 |
| (1,240) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:34:LEU:HB2 | 30 | 0.62 |
| (1,240) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:34:LEU:HB2 | 30 | 0.62 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:46:GLN:HG2 | 15 | 0.62 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:46:GLN:HG2 | 15 | 0.62 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:46:GLN:HG2 | 15 | 0.62 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB2 | 20 | 0.62 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB2 | 20 | 0.62 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB2 | 20 | 0.62 |
| (1,468) | 1:A:47:ILE:HA | 1:A:48:LEU:HD11 | 18 | 0.61 |
| (1,468) | 1:A:47:ILE:HA | 1:A:48:LEU:HD12 | 18 | 0.61 |
| (1,468) | 1:A:47:ILE:HA | 1:A:48:LEU:HD13 | 18 | 0.61 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:62:ARG:HG3 | 7 | 0.61 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:62:ARG:HG3 | 7 | 0.61 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:62:ARG:HG3 | 7 | 0.61 |
| (1,1248) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:62:ARG:HB3 | 8 | 0.61 |
| (1,1248) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:62:ARG:HB3 | 20 | 0.61 |
| (1,1592) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:30:SER:H | 20 | 0.6 |
| (1,1592) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:30:SER:H | 20 | 0.6 |
| (1,1592) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:30:SER:H | 20 | 0.6 |
| (1,1248) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:62:ARG:HB3 | 16 | 0.6 |
| (1,502) | 1:A:19:ILE:HD11 | 1:A:25:ILE:HG13 | 2 | 0.59 |
| (1,502) | 1:A:19:ILE:HD12 | 1:A:25:ILE:HG13 | 2 | 0.59 |
| (1,502) | 1:A:19:ILE:HD13 | 1:A:25:ILE:HG13 | 2 | 0.59 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:62:ARG:HG3 | 22 | 0.59 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:62:ARG:HG3 | 22 | 0.59 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:62:ARG:HG3 | 22 | 0.59 |
| (1,1610) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:9:LEU:HD11 | 13 | 0.59 |
| (1,1610) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:9:LEU:HD12 | 13 | 0.59 |
| (1,1610) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:9:LEU:HD13 | 13 | 0.59 |
| (1,1610) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:9:LEU:HD11 | 13 | 0.59 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1610) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:9:LEU:HD12 | 13 | 0.59 |
| (1,1610) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:9:LEU:HD13 | 13 | 0.59 |
| (1,1610) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:9:LEU:HD11 | 13 | 0.59 |
| (1,1610) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:9:LEU:HD12 | 13 | 0.59 |
| (1,1610) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:9:LEU:HD13 | 13 | 0.59 |
| (1,1589) | 1:A:20:ARG:HG3 | 1:A:67:ARG:HE | 12 | 0.59 |
| (1,1589) | 1:A:20:ARG:HG3 | 1:A:67:ARG:HE | 15 | 0.59 |
| (1,1302) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:31:LEU:HB3 | 11 | 0.59 |
| (1,1128) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:37:ASP:H | 5 | 0.59 |
| (1,1128) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:37:ASP:H | 5 | 0.59 |
| (1,1128) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:37:ASP:H | 5 | 0.59 |
| (1,296) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:19:ILE:HG13 | 16 | 0.58 |
| (1,296) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:19:ILE:HG13 | 16 | 0.58 |
| (1,296) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:19:ILE:HG13 | 16 | 0.58 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 10 | 0.58 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 10 | 0.58 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 10 | 0.58 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 20 | 0.58 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 20 | 0.58 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 20 | 0.58 |
| (1,1638) | 1:A:57:PRO:HB3 | 1:A:59:ARG:HB2 | 28 | 0.58 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 26 | 0.58 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB3 | 1:A:64:LEU:H | 26 | 0.58 |
| (1,1271) | 1:A:62:ARG:HA | 1:A:58:ILE:HG12 | 10 | 0.58 |
| (1,1248) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:62:ARG:HB3 | 3 | 0.58 |
| (1,1248) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:62:ARG:HB3 | 15 | 0.58 |
| (1,1248) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:62:ARG:HB3 | 23 | 0.58 |
| (1,1271) | 1:A:62:ARG:HA | 1:A:58:ILE:HG12 | 2 | 0.57 |
| (1,798) | 1:A:51:GLU:HG2 | 1:A:50:ARG:HG2 | 23 | 0.56 |
| (1,798) | 1:A:51:GLU:HG3 | 1:A:50:ARG:HG2 | 23 | 0.56 |
| (1,1303) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:31:LEU:HB3 | 28 | 0.56 |
| (1,1100) | 1:A:40:MET:HG2 | 1:A:39:LEU:HD21 | 28 | 0.56 |
| (1,1100) | 1:A:40:MET:HG2 | 1:A:39:LEU:HD22 | 28 | 0.56 |
| (1,1100) | 1:A:40:MET:HG2 | 1:A:39:LEU:HD23 | 28 | 0.56 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:74:SER:HB2 | 20 | 0.55 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:74:SER:HB2 | 20 | 0.55 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:74:SER:HB2 | 20 | 0.55 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:31:LEU:HA | 20 | 0.55 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:31:LEU:HA | 20 | 0.55 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:31:LEU:HA | 20 | 0.55 |
| (1,240) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:34:LEU:HB2 | 16 | 0.55 |
| (1,240) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:34:LEU:HB2 | 16 | 0.55 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,240) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:34:LEU:HB2 | 16 | 0.55 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 24 | 0.55 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 24 | 0.55 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 24 | 0.55 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 18 | 0.55 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB3 | 1:A:64:LEU:H | 18 | 0.55 |
| (1,1369) | 1:A:71:GLU:HG2 | 1:A:72:MET:H | 22 | 0.55 |
| (1,1248) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:62:ARG:HB3 | 4 | 0.55 |
| (1,1248) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:62:ARG:HB3 | 18 | 0.55 |
| (1,1239) | 1:A:60:GLU:HB3 | 1:A:56:LEU:HB2 | 8 | 0.55 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD11 | 1:A:43:GLU:HG2 | 11 | 0.54 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD12 | 1:A:43:GLU:HG2 | 11 | 0.54 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD13 | 1:A:43:GLU:HG2 | 11 | 0.54 |
| (1,240) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:34:LEU:HB2 | 17 | 0.54 |
| (1,240) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:34:LEU:HB2 | 17 | 0.54 |
| (1,240) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:34:LEU:HB2 | 17 | 0.54 |
| (1,1248) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:62:ARG:HB3 | 5 | 0.54 |
| (1,1248) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:62:ARG:HB3 | 13 | 0.54 |
| (1,778) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:6:GLN:HE21 | 27 | 0.53 |
| (1,700) | 1:A:59:ARG:HA | 1:A:62:ARG:HD2 | 10 | 0.53 |
| (1,240) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:34:LEU:HB2 | 13 | 0.53 |
| (1,240) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:34:LEU:HB2 | 13 | 0.53 |
| (1,240) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:34:LEU:HB2 | 13 | 0.53 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 8 | 0.53 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB3 | 1:A:64:LEU:H | 8 | 0.53 |
| (1,1248) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:62:ARG:HB3 | 1 | 0.53 |
| (1,1248) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:62:ARG:HB3 | 17 | 0.53 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB2 | 8 | 0.53 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB2 | 8 | 0.53 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB2 | 8 | 0.53 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD11 | 1:A:43:GLU:HG2 | 24 | 0.52 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD12 | 1:A:43:GLU:HG2 | 24 | 0.52 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD13 | 1:A:43:GLU:HG2 | 24 | 0.52 |
| (1,1589) | 1:A:20:ARG:HG3 | 1:A:67:ARG:HE | 5 | 0.52 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:70:GLN:HE21 | 29 | 0.51 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:70:GLN:HE21 | 29 | 0.51 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:70:GLN:HE21 | 29 | 0.51 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:25:ILE:HG13 | 10 | 0.51 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:25:ILE:HG13 | 10 | 0.51 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:25:ILE:HG13 | 10 | 0.51 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 29 | 0.51 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 29 | 0.51 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 29 | 0.51 |
| (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 13 | 0.51 |
| (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 13 | 0.51 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 28 | 0.51 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB3 | 1:A:64:LEU:H | 28 | 0.51 |
| (1,1248) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:62:ARG:HB3 | 21 | 0.51 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:74:SER:HB2 | 13 | 0.5 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:74:SER:HB2 | 13 | 0.5 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:74:SER:HB2 | 13 | 0.5 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:31:LEU:HA | 13 | 0.5 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:31:LEU:HA | 13 | 0.5 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:31:LEU:HA | 13 | 0.5 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD11 | 1:A:43:GLU:HG2 | 27 | 0.5 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD12 | 1:A:43:GLU:HG2 | 27 | 0.5 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD13 | 1:A:43:GLU:HG2 | 27 | 0.5 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:20:ARG:HB2 | 12 | 0.5 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:20:ARG:HB2 | 12 | 0.5 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:20:ARG:HB2 | 12 | 0.5 |
| (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 15 | 0.5 |
| (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 15 | 0.5 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 14 | 0.5 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB3 | 1:A:64:LEU:H | 14 | 0.5 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 19 | 0.5 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB3 | 1:A:64:LEU:H | 19 | 0.5 |
| (1,1248) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:62:ARG:HB3 | 22 | 0.5 |
| (1,1196) | 1:A:56:LEU:HD21 | 1:A:56:LEU:HA | 20 | 0.5 |
| (1,1196) | 1:A:56:LEU:HD22 | 1:A:56:LEU:HA | 20 | 0.5 |
| (1,1196) | 1:A:56:LEU:HD23 | 1:A:56:LEU:HA | 20 | 0.5 |
| (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:34:LEU:HA | 13 | 0.5 |
| (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:34:LEU:HA | 13 | 0.5 |
| (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:34:LEU:HA | 13 | 0.5 |
| (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:34:LEU:HA | 24 | 0.5 |
| (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:34:LEU:HA | 24 | 0.5 |
| (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:34:LEU:HA | 24 | 0.5 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 19 | 0.49 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 19 | 0.49 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 19 | 0.49 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:62:ARG:HG3 | 4 | 0.49 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:62:ARG:HG3 | 4 | 0.49 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:62:ARG:HG3 | 4 | 0.49 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 17 | 0.49 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB3 | 1:A:64:LEU:H | 17 | 0.49 |



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

| (1,1327) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:71:GLU:HB2 3 0.4 (1,1327) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:71:GLU:HB2 3 0.4 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 14 0.4 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 14 0.4 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 14 0.4 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 12 0.4 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 1 0.4 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 1 0.4 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 1 0.4 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 1 0.4 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 27 0.4 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 27 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A: | 19 19 19 19 18 18 18 18 18 18 18 |
|---|--|
| (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 14 0.4 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 14 0.4 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 14 0.4 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 12 0.4 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 1 0.4 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 1 0.4 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 1 0.4 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:24:GLY:HA2 27 0.4 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 27 0.4 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 27 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 23 0.4 | 19 19 19 18 18 18 18 18 18 18 |
| (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 14 0.4 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 14 0.4 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 12 0.4 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 1 0.4 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 1 0.4 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 1 0.4 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 1 0.4 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 1 0.4 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 27 0.4 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 27 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 23 0.4 | 19 19 18 18 18 18 18 18 18 18 |
| (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 14 0.4 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 12 0.4 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 1 0.4 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 1 0.4 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 1 0.4 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 27 0.4 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 27 0.4 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 27 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1648) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 23 0.4 | 19 18 18 18 18 18 18 18 18 |
| (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 12 0.4 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 1 0.4 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 1 0.4 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 1 0.4 (1,394) 1:A:29:ILE:HG23 1:A:24:GLY:HA2 27 0.4 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 27 0.4 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 27 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1648) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 23 0.4 | 18 18 18 18 18 18 18 18 18 |
| (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 1 0.4 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 1 0.4 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 1 0.4 (1,394) 1:A:29:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 1 0.4 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 27 0.4 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 27 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 23 0.4 | 18 18 18 18 18 18 18 18 |
| (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 1 0.4 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 1 0.4 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 27 0.4 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 27 0.4 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 27 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1648) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 23 0.4 | 18 18 18 18 18 18 18 18 |
| (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 1 0.4 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 27 0.4 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 27 0.4 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 27 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1648) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 23 0.4 | 18 18 18 18 18 18 |
| (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 27 0.4 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 27 0.4 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 27 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1648) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 23 0.4 | 18 18 18 18 18 |
| (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 27 0.4 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 27 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 23 0.4 | 18 18 18 18 |
| (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 27 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 23 0.4 | 18 18 18 18 |
| (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 23 0.4 | 18 18 |
| (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1648) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 23 0.4 | 18 |
| (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.4 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 23 0.4 | 18 |
| (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 23 0.4 | |
| | |
| | 8 |
| (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 23 0.4 | 18 |
| (1,1595) 1:A:68:LYS:HB2 1:A:64:LEU:H 9 0.4 | 18 |
| (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 9 0.4 | 18 |
| (1,1595) 1:A:68:LYS:HB2 1:A:64:LEU:H 24 0.4 | 8 |
| (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 24 0.4 | 18 |
| (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 27 0.4 | 18 |
| (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 27 0.4 | 18 |
| (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 27 0.4 | 8 |
| (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD11 2 0.4 | 7 |
| (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD12 2 0.4 | 7 |
| (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD13 2 0.4 | 7 |
| (1,294) 1:A:17:LEU:HD11 1:A:36:LEU:HB2 26 0.4 | 17 |
| (1,294) 1:A:17:LEU:HD12 1:A:36:LEU:HB2 26 0.4 | 7 |
| (1,294) 1:A:17:LEU:HD13 1:A:36:LEU:HB2 26 0.4 | 17 |
| (1,294) 1:A:17:LEU:HD21 1:A:36:LEU:HB2 26 0.4 | 17 |
| (1,294) 1:A:17:LEU:HD22 1:A:36:LEU:HB2 26 0.4 | 17 |
| (1,294) 1:A:17:LEU:HD23 1:A:36:LEU:HB2 26 0.4 | 7 |
| (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 11 0.4 | 7 |
| (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 11 0.4 | 7 |
| (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 11 0.4 | 7 |
| (1,1369) 1:A:71:GLU:HG2 1:A:72:MET:H 24 0.4 | 7 |
| (1,1302) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:31:LEU:HB3 13 0.4 | 7 |
| (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 11 0.4 | 7 |
| (1,1248) 1:A:61:VAL:HA 1:A:62:ARG:HB3 7 0.4 | 7 |
| (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 17 0.4 | 7 |
| (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 17 0.4 | 7 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:34:LEU:HA | 17 | 0.47 |
| (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:34:LEU:HA | 20 | 0.47 |
| (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:34:LEU:HA | 20 | 0.47 |
| (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:34:LEU:HA | 20 | 0.47 |
| (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:34:LEU:HA | 29 | 0.47 |
| (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:34:LEU:HA | 29 | 0.47 |
| (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:34:LEU:HA | 29 | 0.47 |
| (1,778) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:6:GLN:HE21 | 1 | 0.46 |
| (1,1638) | 1:A:57:PRO:HB3 | 1:A:59:ARG:HB2 | 12 | 0.46 |
| (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 1 | 0.46 |
| (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 1 | 0.46 |
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:13:VAL:H | 30 | 0.46 |
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:13:VAL:H | 30 | 0.46 |
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:13:VAL:H | 30 | 0.46 |
| (1,1508) | 1:A:72:MET:HG3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 13 | 0.46 |
| (1,1508) | 1:A:72:MET:HG3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 13 | 0.46 |
| (1,1508) | 1:A:72:MET:HG3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 13 | 0.46 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:70:GLN:HE21 | 12 | 0.45 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:70:GLN:HE21 | 12 | 0.45 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:70:GLN:HE21 | 12 | 0.45 |
| (1,798) | 1:A:51:GLU:HG2 | 1:A:50:ARG:HG2 | 12 | 0.45 |
| (1,798) | 1:A:51:GLU:HG3 | 1:A:50:ARG:HG2 | 12 | 0.45 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:74:SER:HB2 | 16 | 0.45 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:74:SER:HB2 | 16 | 0.45 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:74:SER:HB2 | 16 | 0.45 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:31:LEU:HA | 16 | 0.45 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:31:LEU:HA | 16 | 0.45 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:31:LEU:HA | 16 | 0.45 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:25:ILE:HG13 | 22 | 0.45 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:25:ILE:HG13 | 22 | 0.45 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:25:ILE:HG13 | 22 | 0.45 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 22 | 0.45 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB3 | 1:A:64:LEU:H | 22 | 0.45 |
| (1,1592) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:30:SER:H | 26 | 0.45 |
| (1,1592) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:30:SER:H | 26 | 0.45 |
| (1,1592) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:30:SER:H | 26 | 0.45 |
| (1,1126) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:52:HIS:H | 22 | 0.45 |
| (1,1126) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:52:HIS:H | 22 | 0.45 |
| (1,1126) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:52:HIS:H | 22 | 0.45 |
| (1,1123) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:52:HIS:HB2 | 18 | 0.45 |
| (1,1123) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:52:HIS:HB2 | 18 | 0.45 |
| (1,1123) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:52:HIS:HB2 | 18 | 0.45 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB2 | 18 | 0.45 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB2 | 18 | 0.45 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB2 | 18 | 0.45 |
| (1,72) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:6:GLN:HE21 | 18 | 0.44 |
| (1,72) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:6:GLN:HE21 | 18 | 0.44 |
| (1,72) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:6:GLN:HE21 | 18 | 0.44 |
| (1,72) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:6:GLN:HE21 | 18 | 0.44 |
| (1,72) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:6:GLN:HE21 | 18 | 0.44 |
| (1,72) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:6:GLN:HE21 | 18 | 0.44 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:66:LEU:HA | 30 | 0.44 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:66:LEU:HA | 30 | 0.44 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:66:LEU:HA | 30 | 0.44 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:25:ILE:HG13 | 24 | 0.44 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:25:ILE:HG13 | 24 | 0.44 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:25:ILE:HG13 | 24 | 0.44 |
| (1,316) | 1:A:40:MET:HB2 | 1:A:39:LEU:HD21 | 24 | 0.44 |
| (1,316) | 1:A:40:MET:HB2 | 1:A:39:LEU:HD22 | 24 | 0.44 |
| (1,316) | 1:A:40:MET:HB2 | 1:A:39:LEU:HD23 | 24 | 0.44 |
| (1,316) | 1:A:40:MET:HB2 | 1:A:39:LEU:HD21 | 27 | 0.44 |
| (1,316) | 1:A:40:MET:HB2 | 1:A:39:LEU:HD22 | 27 | 0.44 |
| (1,316) | 1:A:40:MET:HB2 | 1:A:39:LEU:HD23 | 27 | 0.44 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:26:ASN:HB3 | 5 | 0.44 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:26:ASN:HB3 | 5 | 0.44 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:26:ASN:HB3 | 5 | 0.44 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:57:PRO:HB3 | 14 | 0.44 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:57:PRO:HB3 | 14 | 0.44 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:57:PRO:HB3 | 14 | 0.44 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB2 | 16 | 0.44 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB2 | 16 | 0.44 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB2 | 16 | 0.44 |
| (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:34:LEU:HA | 3 | 0.44 |
| (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:34:LEU:HA | 3 | 0.44 |
| (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:34:LEU:HA | 3 | 0.44 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:31:LEU:HA | 5 | 0.44 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:31:LEU:HA | 5 | 0.44 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:31:LEU:HA | 5 | 0.44 |
| (1,1006) | 1:A:33:ASP:HB2 | 1:A:30:SER:H | 27 | 0.44 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:70:GLN:HE21 | 30 | 0.43 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:70:GLN:HE21 | 30 | 0.43 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:70:GLN:HE21 | 30 | 0.43 |
| (1,847) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HD2 | 25 | 0.43 |
| (1,847) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HD3 | 25 | 0.43 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:26:ASN:HB3 | 3 | 0.43 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:26:ASN:HB3 | 3 | 0.43 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:26:ASN:HB3 | 3 | 0.43 |
| (1,1099) | 1:A:40:MET:HG3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 27 | 0.43 |
| (1,1099) | 1:A:40:MET:HG3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 27 | 0.43 |
| (1,1099) | 1:A:40:MET:HG3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 27 | 0.43 |
| (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:34:LEU:HA | 19 | 0.43 |
| (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:34:LEU:HA | 19 | 0.43 |
| (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:34:LEU:HA | 19 | 0.43 |
| (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:34:LEU:HA | 26 | 0.43 |
| (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:34:LEU:HA | 26 | 0.43 |
| (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:34:LEU:HA | 26 | 0.43 |
| (1,739) | 1:A:70:GLN:HA | 1:A:71:GLU:HB2 | 15 | 0.42 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:66:LEU:HA | 18 | 0.42 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:66:LEU:HA | 18 | 0.42 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:66:LEU:HA | 18 | 0.42 |
| (1,296) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:19:ILE:HG13 | 7 | 0.42 |
| (1,296) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:19:ILE:HG13 | 7 | 0.42 |
| (1,296) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:19:ILE:HG13 | 7 | 0.42 |
| (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 22 | 0.42 |
| (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 22 | 0.42 |
| (1,1369) | 1:A:71:GLU:HG2 | 1:A:72:MET:H | 25 | 0.42 |
| (1,1100) | 1:A:40:MET:HG2 | 1:A:39:LEU:HD21 | 24 | 0.42 |
| (1,1100) | 1:A:40:MET:HG2 | 1:A:39:LEU:HD22 | 24 | 0.42 |
| (1,1100) | 1:A:40:MET:HG2 | 1:A:39:LEU:HD23 | 24 | 0.42 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:70:GLN:HE21 | 24 | 0.41 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:70:GLN:HE21 | 24 | 0.41 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:70:GLN:HE21 | 24 | 0.41 |
| (1,798) | 1:A:51:GLU:HG2 | 1:A:50:ARG:HG2 | 25 | 0.41 |
| (1,798) | 1:A:51:GLU:HG3 | 1:A:50:ARG:HG2 | 25 | 0.41 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:20:ARG:HB2 | 7 | 0.41 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:20:ARG:HB2 | 7 | 0.41 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:20:ARG:HB2 | 7 | 0.41 |
| (1,222) | 1:A:31:LEU:HB3 | 1:A:36:LEU:HD21 | 5 | 0.41 |
| (1,222) | 1:A:31:LEU:HB3 | 1:A:36:LEU:HD22 | 5 | 0.41 |
| (1,222) | 1:A:31:LEU:HB3 | 1:A:36:LEU:HD23 | 5 | 0.41 |
| (1,1592) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:30:SER:H | 29 | 0.41 |
| (1,1592) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:30:SER:H | 29 | 0.41 |
| (1,1592) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:30:SER:H | 29 | 0.41 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:46:GLN:HG2 | 12 | 0.41 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:46:GLN:HG2 | 12 | 0.41 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:46:GLN:HG2 | 12 | 0.41 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:46:GLN:HG2 | 22 | 0.41 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:46:GLN:HG2 | 22 | 0.41 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:46:GLN:HG2 | 22 | 0.41 |
| (1,1271) | 1:A:62:ARG:HA | 1:A:58:ILE:HG12 | 26 | 0.41 |
| (1,1241) | 1:A:60:GLU:HB2 | 1:A:61:VAL:HG21 | 2 | 0.41 |
| (1,1241) | 1:A:60:GLU:HB2 | 1:A:61:VAL:HG22 | 2 | 0.41 |
| (1,1241) | 1:A:60:GLU:HB2 | 1:A:61:VAL:HG23 | 2 | 0.41 |
| (1,1126) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:52:HIS:H | 18 | 0.41 |
| (1,1126) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:52:HIS:H | 18 | 0.41 |
| (1,1126) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:52:HIS:H | 18 | 0.41 |
| (1,1107) | 1:A:48:LEU:HA | 1:A:52:HIS:HB2 | 1 | 0.41 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:H | 27 | 0.41 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:H | 27 | 0.41 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:H | 27 | 0.41 |
| (1,787) | 1:A:51:GLU:HB3 | 1:A:6:GLN:HE21 | 5 | 0.4 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD11 | 18 | 0.4 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD12 | 18 | 0.4 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD13 | 18 | 0.4 |
| (1,1584) | 1:A:59:ARG:HG3 | 1:A:58:ILE:H | 20 | 0.4 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:46:GLN:HG2 | 2 | 0.4 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:46:GLN:HG2 | 2 | 0.4 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:46:GLN:HG2 | 2 | 0.4 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:H | 3 | 0.4 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:H | 3 | 0.4 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:H | 3 | 0.4 |
| (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:34:LEU:HA | 28 | 0.4 |
| (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:34:LEU:HA | 28 | 0.4 |
| (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:34:LEU:HA | 28 | 0.4 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:70:GLN:HE21 | 27 | 0.39 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:70:GLN:HE21 | 27 | 0.39 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:70:GLN:HE21 | 27 | 0.39 |
| (1,896) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:6:GLN:HE21 | 12 | 0.39 |
| (1,896) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:6:GLN:HE21 | 12 | 0.39 |
| (1,896) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:6:GLN:HE21 | 12 | 0.39 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:66:LEU:HA | 11 | 0.39 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:66:LEU:HA | 11 | 0.39 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:66:LEU:HA | 11 | 0.39 |
| (1,1592) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:30:SER:H | 17 | 0.39 |
| (1,1592) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:30:SER:H | 17 | 0.39 |
| (1,1592) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:30:SER:H | 17 | 0.39 |
| (1,1548) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:21:ASP:HB2 | 22 | 0.39 |
| (1,1548) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:21:ASP:HB2 | 22 | 0.39 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1548) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:21:ASP:HB2 | 22 | 0.39 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:46:GLN:HG2 | 6 | 0.39 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:46:GLN:HG2 | 6 | 0.39 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:46:GLN:HG2 | 6 | 0.39 |
| (1,1303) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:31:LEU:HB3 | 7 | 0.39 |
| (1,1302) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:31:LEU:HB3 | 30 | 0.39 |
| (1,1179) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:56:LEU:HB3 | 1 | 0.39 |
| (1,1179) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:56:LEU:HB3 | 1 | 0.39 |
| (1,1179) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:56:LEU:HB3 | 1 | 0.39 |
| (1,116) | 1:A:55:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HB3 | 1 | 0.39 |
| (1,116) | 1:A:55:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HB3 | 1 | 0.39 |
| (1,116) | 1:A:55:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HB3 | 1 | 0.39 |
| (1,32) | 1:A:27:LEU:HD11 | 1:A:70:GLN:HE21 | 12 | 0.38 |
| (1,32) | 1:A:27:LEU:HD12 | 1:A:70:GLN:HE21 | 12 | 0.38 |
| (1,32) | 1:A:27:LEU:HD13 | 1:A:70:GLN:HE21 | 12 | 0.38 |
| (1,32) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:70:GLN:HE21 | 12 | 0.38 |
| (1,32) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:70:GLN:HE21 | 12 | 0.38 |
| (1,32) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:70:GLN:HE21 | 12 | 0.38 |
| (1,1589) | 1:A:20:ARG:HG3 | 1:A:67:ARG:HE | 21 | 0.38 |
| (1,1642) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:6:GLN:HE21 | 28 | 0.37 |
| (1,1642) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:6:GLN:HE21 | 28 | 0.37 |
| (1,1642) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:6:GLN:HE21 | 28 | 0.37 |
| (1,114) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:57:PRO:HG3 | 1 | 0.37 |
| (1,114) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:57:PRO:HG3 | 1 | 0.37 |
| (1,114) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:57:PRO:HG3 | 1 | 0.37 |
| (1,1638) | 1:A:57:PRO:HB3 | 1:A:59:ARG:HB2 | 7 | 0.36 |
| (1,1638) | 1:A:57:PRO:HB3 | 1:A:59:ARG:HB2 | 24 | 0.36 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 7 | 0.36 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB3 | 1:A:64:LEU:H | 7 | 0.36 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:31:LEU:HA | 28 | 0.36 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:31:LEU:HA | 28 | 0.36 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:31:LEU:HA | 28 | 0.36 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 8 | 0.35 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 8 | 0.35 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 8 | 0.35 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HB2 | 11 | 0.35 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HB2 | 11 | 0.35 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HB2 | 11 | 0.35 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD21 | 1:A:36:LEU:HB2 | 11 | 0.35 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD22 | 1:A:36:LEU:HB2 | 11 | 0.35 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD23 | 1:A:36:LEU:HB2 | 11 | 0.35 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 3 | 0.35 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 3 | 0.35 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 3 | 0.35 |
| (1,1642) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:6:GLN:HE21 | 1 | 0.35 |
| (1,1642) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:6:GLN:HE21 | 1 | 0.35 |
| (1,1642) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:6:GLN:HE21 | 1 | 0.35 |
| (1,1638) | 1:A:57:PRO:HB3 | 1:A:59:ARG:HB2 | 19 | 0.35 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:46:GLN:HG2 | 16 | 0.35 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:46:GLN:HG2 | 16 | 0.35 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:46:GLN:HG2 | 16 | 0.35 |
| (1,1369) | 1:A:71:GLU:HG2 | 1:A:72:MET:H | 19 | 0.35 |
| (1,1303) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:31:LEU:HB3 | 19 | 0.35 |
| (1,1303) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:31:LEU:HB3 | 22 | 0.35 |
| (1,1302) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:31:LEU:HB3 | 16 | 0.35 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HB2 | 14 | 0.35 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HG2 | 14 | 0.35 |
| (1,994) | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD21 | 27 | 0.34 |
| (1,994) | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD22 | 27 | 0.34 |
| (1,994) | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD23 | 27 | 0.34 |
| (1,787) | 1:A:51:GLU:HB3 | 1:A:6:GLN:HE21 | 3 | 0.34 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:25:ILE:HG13 | 7 | 0.34 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:25:ILE:HG13 | 7 | 0.34 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:25:ILE:HG13 | 7 | 0.34 |
| (1,1369) | 1:A:71:GLU:HG2 | 1:A:72:MET:H | 10 | 0.34 |
| (1,845) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HB2 | 20 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HB3 | 20 | 0.33 |
| (1,502) | 1:A:19:ILE:HD11 | 1:A:25:ILE:HG13 | 1 | 0.33 |
| (1,502) | 1:A:19:ILE:HD12 | 1:A:25:ILE:HG13 | 1 | 0.33 |
| (1,502) | 1:A:19:ILE:HD13 | 1:A:25:ILE:HG13 | 1 | 0.33 |
| (1,1389) | 1:A:12:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD21 | 13 | 0.33 |
| (1,1389) | 1:A:12:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD22 | 13 | 0.33 |
| (1,1389) | 1:A:12:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD23 | 13 | 0.33 |
| (1,1389) | 1:A:12:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD21 | 13 | 0.33 |
| (1,1389) | 1:A:12:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD22 | 13 | 0.33 |
| (1,1389) | 1:A:12:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD23 | 13 | 0.33 |
| (1,1389) | 1:A:12:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD21 | 13 | 0.33 |
| (1,1389) | 1:A:12:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD22 | 13 | 0.33 |
| (1,1389) | 1:A:12:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD23 | 13 | 0.33 |
| (1,1369) | 1:A:71:GLU:HG2 | 1:A:72:MET:H | 28 | 0.33 |
| (1,994) | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD21 | 3 | 0.32 |
| (1,994) | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD22 | 3 | 0.32 |
| (1,994) | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD23 | 3 | 0.32 |
| (1,778) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:6:GLN:HE21 | 14 | 0.32 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,668) | 1:A:49:GLU:HG2 | 1:A:46:GLN:HA | 18 | 0.32 |
| (1,468) | 1:A:47:ILE:HA | 1:A:48:LEU:HD11 | 22 | 0.32 |
| (1,468) | 1:A:47:ILE:HA | 1:A:48:LEU:HD12 | 22 | 0.32 |
| (1,468) | 1:A:47:ILE:HA | 1:A:48:LEU:HD13 | 22 | 0.32 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD11 | 2 | 0.32 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD12 | 2 | 0.32 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD13 | 2 | 0.32 |
| (1,1271) | 1:A:62:ARG:HA | 1:A:58:ILE:HG12 | 27 | 0.32 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:29:SER:HB2 | 13 | 0.32 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:29:SER:HB2 | 13 | 0.32 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:29:SER:HB2 | 13 | 0.32 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:29:SER:HB2 | 20 | 0.32 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:29:SER:HB2 | 20 | 0.32 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:29:SER:HB2 | 20 | 0.32 |
| (1,54) | 1:A:20:ARG:HG3 | 1:A:67:ARG:HD3 | 16 | 0.31 |
| (1,54) | 1:A:20:ARG:HG3 | 1:A:10:VAL:HA | 16 | 0.31 |
| (1,54) | 1:A:7:ARG:HG2 | 1:A:10:VAL:HA | 16 | 0.31 |
| (1,54) | 1:A:7:ARG:HG3 | 1:A:10:VAL:HA | 16 | 0.31 |
| (1,236) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:66:LEU:H | 13 | 0.31 |
| (1,236) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:66:LEU:H | 13 | 0.31 |
| (1,236) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:66:LEU:H | 13 | 0.31 |
| (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 14 | 0.31 |
| (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 14 | 0.31 |
| (1,1369) | 1:A:71:GLU:HG2 | 1:A:72:MET:H | 21 | 0.31 |
| (1,1220) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:ARG:HD2 | 26 | 0.31 |
| (1,1220) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:ARG:HD2 | 26 | 0.31 |
| (1,1220) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:ARG:HD2 | 26 | 0.31 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:29:SER:HB2 | 14 | 0.31 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:29:SER:HB2 | 14 | 0.31 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:29:SER:HB2 | 14 | 0.31 |
| (1,994) | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD21 | 17 | 0.3 |
| (1,994) | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD22 | 17 | 0.3 |
| (1,994) | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD23 | 17 | 0.3 |
| (1,845) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HB2 | 3 | 0.3 |
| (1,845) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HB3 | 3 | 0.3 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:74:SER:HB2 | 14 | 0.3 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:74:SER:HB2 | 14 | 0.3 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:74:SER:HB2 | 14 | 0.3 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:31:LEU:HA | 14 | 0.3 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:31:LEU:HA | 14 | 0.3 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:31:LEU:HA | 14 | 0.3 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:20:ARG:HB2 | 19 | 0.3 |



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

| (1,475) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:20:ARG:HB2 19 0.3 (1,469) 1:A:17:LEU:HD11 1:A:16:ILE:H 16 0.3 (1,469) 1:A:17:LEU:HD11 1:A:16:ILE:H 16 0.3 (1,469) 1:A:17:LEU:HD13 1:A:16:ILE:H 16 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD11 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD12 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD12 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD22 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD22 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD23 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,1618) 1:A:45:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 9 0.3 (1,1618) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|--|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,469) 1:A:17:LEU:HD11 1:A:16:ILE:H 16 0.3 (1,469) 1:A:17:LEU:HD12 1:A:16:ILE:H 16 0.3 (1,469) 1:A:17:LEU:HD13 1:A:16:ILE:H 16 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD11 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD12 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD21 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD22 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD23 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD23 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD23 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,1618) 1:A:A:4:VAL:HG21 1:A:36:PARG:HD3 9 0.3 (1,1618) 1:A:A:4:VAL:HG21 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1263) 1:A:6:AA:WA:HG23 1:A:40:MET:HB2 | (1,475) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:20:ARG:HB2 | 19 | 0.3 |
| (1,469) 1:A:17:LEU:HD12 1:A:16:ILE:H 16 0.3 (1,469) 1:A:17:LEU:HD13 1:A:16:ILE:H 16 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD11 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD12 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD21 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD22 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD22 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD23 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD23 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD23 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 9 0.3 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 | (1,475) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:20:ARG:HB2 | 19 | 0.3 |
| (1,469) 1:A:17:LEU:HD13 1:A:16:ILE:H 16 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD11 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD12 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD13 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD21 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD23 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,168) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 9 0.3 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 | (1,469) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:16:ILE:H | 16 | 0.3 |
| (1,294) 1:A:17:LEU:HD11 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD12 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD13 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD21 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD22 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD22 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD23 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD23 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD23 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 9 0.3 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 9 0.3 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 9 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG21 1:A:68:ARG:HB3 22 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1668) 1:A:49:GLU:HG2 1:A:46:GLN:HA 29 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD21 8 0.29 (1,1099) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:46:GLN:HA 5 0.29 (1,1099) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:39:LEU:HD24 8 0.29 (1,1099) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:39:LEU:HD24 8 0.29 (1,1099) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:39:LEU:HD24 8 0.29 (1,1099) 1:A:34:LEU:HD24 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1099) 1:A:34:LEU:HD24 1:A:46:LU:HD24 1: | (1,469) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:16:ILE:H | 16 | 0.3 |
| (1,294) 1:A:17:LEU:HD12 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD13 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD21 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD22 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD22 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD23 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 9 0.3 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 9 0.3 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1668) 1:A:49:GLU:HG2 1:A:46:GLN:HA 29 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD21 8 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD22 8 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD23 8 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HD23 1:A:39:LEU:HD23 8 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HD23 1:A:39:LEU:HD23 8 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HD24 1 1:A:34:LEU:HD24 1 1:A:34:LEU:HD25 1 1:A:34:LEU:HD26 1 1:A:34:LEU:HD27 1 1:A:34:LEU:HD27 1 1:A:34:LEU:HD28 1 1:A:34:LEU:HD29 1 1:A:34:LEU:HD29 1 1:A:34:LEU:HD29 1 1:A:34:LEU:HD21 1 1:A:34:LEU:HD21 1 1 1 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 1 1 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:3 | (1,469) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:16:ILE:H | 16 | 0.3 |
| (1,294) 1:A:17:LEU:HD13 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD21 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD22 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD22 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD23 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD23 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD23 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 9 0.3 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 9 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 25 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1668) 1:A:49:GLU:HG2 1:A:46:GLN:HA 29 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD21 8 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD21 8 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD21 8 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:39:LEU:HD22 8 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HD23 1:A:39:LEU:HD24 8 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HD23 1:A:39:LEU:HD24 8 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HD24 14 0 | (1,294) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HB2 | 3 | 0.3 |
| (1,294) 1:A:17:LEU:HD21 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD22 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD23 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 9 0.3 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 9 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:40:ME | (1,294) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HB2 | 3 | 0.3 |
| (1,294) 1:A:17:LEU:HD22 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,294) 1:A:17:LEU:HD23 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 9 0.3 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 9 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:46:GLN:HA 29 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62: | (1,294) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HB2 | 3 | 0.3 |
| (1,294) 1:A:17:LEU:HD23 1:A:36:LEU:HB2 3 0.3 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 9 0.3 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 9 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1263) 1:A:66:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:49:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:49:SER:HB2 26 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:6 | (1,294) | 1:A:17:LEU:HD21 | 1:A:36:LEU:HB2 | 3 | 0.3 |
| (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 9 0.3 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 9 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 25 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:29:SER:HB3 22 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:49:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:49:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:49:SER:HB2 26 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A: | (1,294) | 1:A:17:LEU:HD22 | 1:A:36:LEU:HB2 | 3 | 0.3 |
| (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 9 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 25 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:49:GEN:HB3 7 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A | (1,294) | 1:A:17:LEU:HD23 | 1:A:36:LEU:HB2 | 3 | 0.3 |
| (1,1542) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 25 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:49:GEN:HB3 7 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1: | (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 9 | 0.3 |
| (1,1542) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 25 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:46:GLN:HA 29 0.29 (1,1018) 1:A:49:GLU:HG2 1:A:46:GLN:HA 29 0.29 (1,1023) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A: | (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 9 | 0.3 |
| (1,1542) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1542) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:40:MET:HB2 18 0.3 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 25 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:49:GLN:HA 29 0.29 (1,1018) 1:A:49:GLU:HG2 1:A:46:GLN:HA 29 0.29 (1,1023) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A: | · · / | 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:40:MET:HB2 | 18 | 0.3 |
| (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 25 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1018) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:46:GLN:HA 29 0.29 (1,1668) 1:A:49:GLU:HG2 1:A:46:GLN:HA 29 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A: | (1,1542) | 1:A:44:VAL:HG22 | 1:A:40:MET:HB2 | 18 | 0.3 |
| (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:46:GLN:HA 29 0.29 (1,168) 1:A:49:GLU:HG2 1:A:46:GLN:HA 29 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD21 8 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A: | , , | | 1:A:40:MET:HB2 | 18 | 0.3 |
| (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:49:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:49:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:49:GLU:HD23 1:A:46:CLU:HA2 29 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD21 8 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD22 8 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 | (1,1271) | 1:A:62:ARG:HA | 1:A:58:ILE:HG12 | 25 | 0.3 |
| (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 22 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:49:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:49:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:49:GLU:HD23 1:A:46:CLU:HA2 29 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD21 8 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD22 8 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 | (1,1263) | 1:A:61:VAL:HG11 | 1:A:62:ARG:HB3 | 22 | 0.3 |
| (1,1018) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,668) 1:A:49:GLU:HG2 1:A:46:GLN:HA 29 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD21 8 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD22 8 0.29 (1,1019) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD23 8 0.29 (1,1019) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD23 8 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HD23 8 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HD21 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A | | 1:A:61:VAL:HG12 | 1:A:62:ARG:HB3 | 22 | 0.3 |
| (1,1018) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,668) 1:A:49:GLU:HG2 1:A:46:GLN:HA 29 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1093) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD21 8 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD22 8 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HD23 8 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 5 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 5 0.29 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LE | (1,1263) | 1:A:61:VAL:HG13 | 1:A:62:ARG:HB3 | 22 | 0.3 |
| (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,668) 1:A:49:GLU:HG2 1:A:46:GLN:HA 29 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD21 8 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD22 8 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HD23 8 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 5 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 5 0.29 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU | (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:29:SER:HB2 | 26 | 0.3 |
| (1,1018) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HB2 26 0.3 (1,668) 1:A:49:GLU:HG2 1:A:46:GLN:HA 29 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1093) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD21 8 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD22 8 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD3 1:A:34:LEU:HD23 8 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 5 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 5 0.29 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU: | (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:29:SER:HB2 | 26 | 0.3 |
| (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD21 8 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD22 8 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD23 8 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HD23 8 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 5 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HD21 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA | (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:29:SER:HB2 | 26 | 0.3 |
| (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD21 8 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD22 8 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD23 8 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HD23 8 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 5 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HD21 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA | (1,668) | 1:A:49:GLU:HG2 | 1:A:46:GLN:HA | 29 | 0.29 |
| (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 7 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD21 8 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD22 8 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD23 8 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 5 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 5 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 5 0.29 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 14 0.28 (1,845) 1:A:8:ASP:HB2 <td< td=""><td>(1,1263)</td><td>1:A:61:VAL:HG11</td><td>1:A:62:ARG:HB3</td><td>7</td><td>0.29</td></td<> | (1,1263) | 1:A:61:VAL:HG11 | 1:A:62:ARG:HB3 | 7 | 0.29 |
| (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD21 8 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD22 8 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD23 8 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 5 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 5 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 5 0.29 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 14 0.28 (1,845) 1:A:8:ASP:HB2 1:A:11:LYS:HB2 30 0.28 | (1,1263) | 1:A:61:VAL:HG12 | 1:A:62:ARG:HB3 | 7 | 0.29 |
| (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD22 8 0.29 (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD23 8 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 5 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 5 0.29 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 14 0.28 (1,845) 1:A:8:ASP:HB2 1:A:11:LYS:HB2 30 0.28 | (1,1263) | 1:A:61:VAL:HG13 | 1:A:62:ARG:HB3 | 7 | 0.29 |
| (1,1099) 1:A:40:MET:HG3 1:A:39:LEU:HD23 8 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 5 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 5 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 5 0.29 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 14 0.28 (1,845) 1:A:8:ASP:HB2 1:A:11:LYS:HB2 30 0.28 | (1,1099) | 1:A:40:MET:HG3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 8 | 0.29 |
| (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 5 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 5 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 5 0.29 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 14 0.28 (1,845) 1:A:8:ASP:HB2 1:A:11:LYS:HB2 30 0.28 | (1,1099) | 1:A:40:MET:HG3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 8 | 0.29 |
| (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 5 0.29 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 5 0.29 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 14 0.28 (1,994) 1:A:8:ASP:HB2 1:A:11:LYS:HB2 30 0.28 | (1,1099) | 1:A:40:MET:HG3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 8 | 0.29 |
| (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 5 0.29 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 14 0.28 (1,994) 1:A:8:ASP:HB2 1:A:11:LYS:HB2 30 0.28 | (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:34:LEU:HA | 5 | 0.29 |
| (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 5 0.29 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 14 0.28 (1,994) 1:A:8:ASP:HB2 1:A:11:LYS:HB2 30 0.28 | (1,1019) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:34:LEU:HA | 5 | 0.29 |
| (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 14 0.28 (1,845) 1:A:8:ASP:HB2 1:A:11:LYS:HB2 30 0.28 | , , | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:34:LEU:HA | 5 | 0.29 |
| (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 14 0.28 (1,994) 1:A:8:ASP:HB2 1:A:11:LYS:HB2 30 0.28 | , , | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD21 | 13 | 0.28 |
| (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 13 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 14 0.28 (1,994) 1:A:8:ASP:HB2 1:A:11:LYS:HB2 30 0.28 | · · / | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD22 | 13 | |
| (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 14 0.28 (1,845) 1:A:8:ASP:HB2 1:A:11:LYS:HB2 30 0.28 | | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD23 | 13 | |
| (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 14 0.28 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 14 0.28 (1,845) 1:A:8:ASP:HB2 1:A:11:LYS:HB2 30 0.28 | / | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD21 | 14 | |
| (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 14 0.28 (1,845) 1:A:8:ASP:HB2 1:A:11:LYS:HB2 30 0.28 | , , | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD22 | 14 | 0.28 |
| (1,845) 1:A:8:ASP:HB2 1:A:11:LYS:HB2 30 0.28 | · · / | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD23 | 14 | |
| | | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HB2 | 30 | 0.28 |
| | X 1 / | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HB3 | 30 | 0.28 |
| (1,1491) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:46:GLN:HG2 4 0.28 | · · / | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:46:GLN:HG2 | 4 | |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:46:GLN:HG2 | 4 | 0.28 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:46:GLN:HG2 | 4 | 0.28 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:29:SER:HB2 | 24 | 0.28 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:29:SER:HB2 | 24 | 0.28 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:29:SER:HB2 | 24 | 0.28 |
| (1,787) | 1:A:51:GLU:HB3 | 1:A:6:GLN:HE21 | 26 | 0.27 |
| (1,549) | 1:A:72:MET:HB2 | 1:A:72:MET:H | 18 | 0.27 |
| (1,502) | 1:A:19:ILE:HD11 | 1:A:25:ILE:HG13 | 24 | 0.27 |
| (1,502) | 1:A:19:ILE:HD12 | 1:A:25:ILE:HG13 | 24 | 0.27 |
| (1,502) | 1:A:19:ILE:HD13 | 1:A:25:ILE:HG13 | 24 | 0.27 |
| (1,1584) | 1:A:59:ARG:HG3 | 1:A:58:ILE:H | 22 | 0.27 |
| (1,1548) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:21:ASP:HB2 | 25 | 0.27 |
| (1,1548) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:21:ASP:HB2 | 25 | 0.27 |
| (1,1548) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:21:ASP:HB2 | 25 | 0.27 |
| (1,1540) | 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:40:MET:HA | 18 | 0.27 |
| (1,1540) | 1:A:44:VAL:HG22 | 1:A:40:MET:HA | 18 | 0.27 |
| (1,1540) | 1:A:44:VAL:HG23 | 1:A:40:MET:HA | 18 | 0.27 |
| (1,1180) | 1:A:55:VAL:HG21 | 1:A:53:ASP:HA | 1 | 0.27 |
| (1,1180) | 1:A:55:VAL:HG22 | 1:A:53:ASP:HA | 1 | 0.27 |
| (1,1180) | 1:A:55:VAL:HG23 | 1:A:53:ASP:HA | 1 | 0.27 |
| (1,994) | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD21 | 24 | 0.26 |
| (1,994) | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD22 | 24 | 0.26 |
| (1,994) | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD23 | 24 | 0.26 |
| (1,549) | 1:A:72:MET:HB2 | 1:A:72:MET:H | 6 | 0.26 |
| (1,1643) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:72:MET:H | 13 | 0.26 |
| (1,1643) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:72:MET:H | 13 | 0.26 |
| (1,1643) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:72:MET:H | 13 | 0.26 |
| (1,1584) | 1:A:59:ARG:HG3 | 1:A:58:ILE:H | 1 | 0.26 |
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:13:VAL:H | 11 | 0.26 |
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:13:VAL:H | 11 | 0.26 |
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:13:VAL:H | 11 | 0.26 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:26:ASN:HB3 | 24 | 0.26 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:26:ASN:HB3 | 24 | 0.26 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:26:ASN:HB3 | 24 | 0.26 |
| (1,111) | 1:A:55:VAL:HG21 | 1:A:49:GLU:HG3 | 25 | 0.26 |
| (1,111) | 1:A:55:VAL:HG22 | 1:A:49:GLU:HG3 | 25 | 0.26 |
| (1,111) | 1:A:55:VAL:HG23 | 1:A:49:GLU:HG3 | 25 | 0.26 |
| (1,1091) | 1:A:39:LEU:HD11 | 1:A:39:LEU:HA | 8 | 0.26 |
| (1,1091) | 1:A:39:LEU:HD12 | 1:A:39:LEU:HA | 8 | 0.26 |
| (1,1091) | 1:A:39:LEU:HD13 | 1:A:39:LEU:HA | 8 | 0.26 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB2 | 29 | 0.26 |
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB2 | 29 | 0.26 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1020) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB2 | 29 | 0.26 |
| (1,845) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HB2 | 24 | 0.25 |
| (1,845) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HB3 | 24 | 0.25 |
| (1,845) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HB2 | 28 | 0.25 |
| (1,845) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HB3 | 28 | 0.25 |
| (1,798) | 1:A:51:GLU:HG2 | 1:A:50:ARG:HG2 | 15 | 0.25 |
| (1,798) | 1:A:51:GLU:HG3 | 1:A:50:ARG:HG2 | 15 | 0.25 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:74:SER:HB2 | 23 | 0.25 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:74:SER:HB2 | 23 | 0.25 |
| (1,60) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:74:SER:HB2 | 23 | 0.25 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:31:LEU:HA | 23 | 0.25 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:31:LEU:HA | 23 | 0.25 |
| (1,60) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:31:LEU:HA | 23 | 0.25 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:20:ARG:HB2 | 1 | 0.25 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:20:ARG:HB2 | 1 | 0.25 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:20:ARG:HB2 | 1 | 0.25 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 15 | 0.25 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB3 | 1:A:64:LEU:H | 15 | 0.25 |
| (1,1271) | 1:A:62:ARG:HA | 1:A:58:ILE:HG12 | 29 | 0.25 |
| (1,994) | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD21 | 26 | 0.24 |
| (1,994) | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD22 | 26 | 0.24 |
| (1,994) | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD23 | 26 | 0.24 |
| (1,787) | 1:A:51:GLU:HB3 | 1:A:6:GLN:HE21 | 15 | 0.24 |
| (1,779) | 1:A:52:HIS:HB2 | 1:A:6:GLN:HE21 | 11 | 0.24 |
| (1,778) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:6:GLN:HE21 | 17 | 0.24 |
| (1,664) | 1:A:49:GLU:HG2 | 1:A:55:VAL:HG21 | 15 | 0.24 |
| (1,664) | 1:A:49:GLU:HG2 | 1:A:55:VAL:HG22 | 15 | 0.24 |
| (1,664) | 1:A:49:GLU:HG2 | 1:A:55:VAL:HG23 | 15 | 0.24 |
| (1,1698) | 1:A:38:SER:H | 1:A:39:LEU:H | 22 | 0.24 |
| (1,1642) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:6:GLN:HE21 | 7 | 0.24 |
| (1,1642) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:6:GLN:HE21 | 7 | 0.24 |
| (1,1642) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:6:GLN:HE21 | 7 | 0.24 |
| (1,54) | 1:A:20:ARG:HG3 | 1:A:67:ARG:HD3 | 18 | 0.23 |
| (1,54) | 1:A:20:ARG:HG3 | 1:A:10:VAL:HA | 18 | 0.23 |
| (1,54) | 1:A:7:ARG:HG2 | 1:A:10:VAL:HA | 18 | 0.23 |
| (1,54) | 1:A:7:ARG:HG3 | 1:A:10:VAL:HA | 18 | 0.23 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:20:ARG:HB2 | 3 | 0.23 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:20:ARG:HB2 | 3 | 0.23 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:20:ARG:HB2 | 3 | 0.23 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:20:ARG:HB2 | 15 | 0.23 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:20:ARG:HB2 | 15 | 0.23 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:20:ARG:HB2 | 15 | 0.23 |



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

| (1,475) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:20:ARG:HB2 26 0.23 (1,475) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:20:ARG:HB2 26 0.23 (1,475) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 26 0.23 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 2 0.23 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 2 0.23 (1,1795) 1:A:68:LYS:HB2 1:A:64:LEU:H 5 0.23 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 5 0.23 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:HB3 15 0.23 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:HB3 15 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1082) 1:A:33:LEU:HB3 1:A:33:ASP:H 12 0.23 (1,1082) 1:A:33:JEU:HB3 1:A:33:AS | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,475) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 26 0.23 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 2 0.23 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 2 0.23 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 2 0.23 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB2 1:A:64:LEU:H 5 0.23 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:HB3 15 0.23 (1,1263) 1:A:64:LEU:HB2 1:A:33:LEU:HB3 21 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,133) 1:A:62:ARG:HB3 1:D:2 <td>(1,475)</td> <td>1:A:22:LEU:HD21</td> <td>1:A:20:ARG:HB2</td> <td>26</td> <td>0.23</td> | (1,475) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:20:ARG:HB2 | 26 | 0.23 |
| (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 2 0.23 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 2 0.23 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 2 0.23 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 2 0.23 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB2 1:A:64:LEU:H 5 0.23 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 5 0.23 (1,1303) 1:A:64:LEU:HB2 1:A:31:LEU:HB3 15 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1082) 1:A:33:ASP:HA 1:A:53:ASP:H 12 0.23 (1,1082) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:AS | (1,475) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:20:ARG:HB2 | 26 | 0.23 |
| (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 2 0.23 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 2 0.23 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB2 1:A:64:LEU:H 5 0.23 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 5 0.23 (1,1303) 1:A:64:LEU:HB2 1:A:31:LEU:HB3 15 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,1082) 1:A:34:LEU:HD21 1:A | (1,475) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:20:ARG:HB2 | 26 | 0.23 |
| (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 2 0.23 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB2 1:A:64:LEU:H 5 0.23 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 5 0.23 (1,1303) 1:A:64:LEU:HB2 1:A:31:LEU:HB3 15 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1263) 1:A:66:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1263) 1:A:66:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1263) 1:A:66:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1028) 1:A:39:LEU:HB3 1:A:33:ASP:H 12 0.23 (1,1028) 1:A:39:LEU:HB3 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,704) 1:A:6:GLN:HA 1:A:6:GLN:HG3 | (1,177) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 2 | 0.23 |
| (1,1595) 1:A:68:LYS:HB2 1:A:64:LEU:H 5 0.23 (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 5 0.23 (1,1303) 1:A:64:LEU:HB2 1:A:31:LEU:HB3 15 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1133) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1082) 1:A:39:LEU:HB3 1:A:39:LEU:H 17 0.23 (1,1082) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,1028) 1:A:6:GLN:HA 1:A:6:G | (1,177) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 2 | 0.23 |
| (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 5 0.23 (1,1303) 1:A:64:LEU:HB2 1:A:31:LEU:HB3 15 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1133) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:33:ASP:H 12 0.23 (1,1082) 1:A:33:ASP:HA 1:A:33:ASP:H 12 0.23 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A | (1,177) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 2 | 0.23 |
| (1,1303) 1:A:64:LEU:HB2 1:A:31:LEU:HB3 15 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1133) 1:A:53:ASP:HA 1:A:53:ASP:H 12 0.23 (1,1082) 1:A:39:LEU:HB3 1:A:39:LEU:H 17 0.23 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,774) 1:A:6:GLN:HA 1:A:6:GLN:HG3 16 0.22 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:6:CARG:HD2 30 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD11 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:25:ILE:HG1 | (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 5 | 0.23 |
| (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1133) 1:A:35:ASP:HA 1:A:53:ASP:H 12 0.23 (1,1082) 1:A:39:LEU:HB3 1:A:39:LEU:H 17 0.23 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,704) 1:A:6:GLN:HA 1:A:6:GLN:HG3 16 0.22 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 30 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD11 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD12 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG1 | (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB3 | 1:A:64:LEU:H | 5 | 0.23 |
| (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1133) 1:A:53:ASP:HA 1:A:53:ASP:H 12 0.23 (1,1082) 1:A:39:LEU:HB3 1:A:39:LEU:H 17 0.23 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,7028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,704) 1:A:6:GLN:HA 1:A:6:GLN:HG3 16 0.22 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 30 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD11 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:35:AE:HG13< | (1,1303) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:31:LEU:HB3 | 15 | 0.23 |
| (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 21 0.23 (1,1133) 1:A:53:ASP:HA 1:A:53:ASP:H 12 0.23 (1,1082) 1:A:39:LEU:HB3 1:A:39:LEU:H 17 0.23 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,7028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,704) 1:A:6:GLN:HA 1:A:6:GLN:HG3 16 0.22 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 30 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD11 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD12 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3< | (1,1263) | 1:A:61:VAL:HG11 | 1:A:62:ARG:HB3 | 21 | 0.23 |
| (1,1133) 1:A:53:ASP:HA 1:A:53:ASP:H 12 0.23 (1,1082) 1:A:39:LEU:HB3 1:A:39:LEU:H 17 0.23 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,7028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,774) 1:A:6:GLN:HA 1:A:6:GLN:HG3 16 0.22 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 30 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD11 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD12 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 12 0.22 (1,1618) 1:A:64:LEU:HB2 1:A:31:LEU:HB3 </td <td>(1,1263)</td> <td>1:A:61:VAL:HG12</td> <td>1:A:62:ARG:HB3</td> <td>21</td> <td>0.23</td> | (1,1263) | 1:A:61:VAL:HG12 | 1:A:62:ARG:HB3 | 21 | 0.23 |
| (1,1082) 1:A:39:LEU:HB3 1:A:39:LEU:H 17 0.23 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,774) 1:A:6:GLN:HA 1:A:6:GLN:HG3 16 0.22 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 30 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD11 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD12 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 12 0.22 (1,1618) 1:A:64:LEU:HB2 1:A:31:LEU:HB3 18 0.22 (1,1994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD | (1,1263) | 1:A:61:VAL:HG13 | 1:A:62:ARG:HB3 | 21 | 0.23 |
| (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,774) 1:A:6:GLN:HA 1:A:6:GLN:HG3 16 0.22 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 30 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD11 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD12 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 12 0.22 (1,1618) 1:A:64:LEU:HB2 1:A:31:LEU:HB3 18 0.22 (1,1994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU: | (1,1133) | 1:A:53:ASP:HA | 1:A:53:ASP:H | 12 | 0.23 |
| (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,774) 1:A:6:GLN:HA 1:A:6:GLN:HG3 16 0.22 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 30 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD11 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD12 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,394) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:59:ARG:HD2 12 0.22 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 12 0.22 (1,1618) 1:A:64:LEU:HB2 1:A:31:LEU:HB3 18 0.22 (1,1994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU | (1,1082) | 1:A:39:LEU:HB3 | 1:A:39:LEU:H | 17 | 0.23 |
| (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 26 0.23 (1,774) 1:A:6:GLN:HA 1:A:6:GLN:HG3 16 0.22 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 30 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD11 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD12 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 12 0.22 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 12 0.22 (1,1303) 1:A:64:LEU:HB2 1:A:31:LEU:HB3 18 0.22 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:I | (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:H | 26 | 0.23 |
| (1,774) 1:A:6:GLN:HA 1:A:6:GLN:HG3 16 0.22 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 30 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD11 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD12 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 12 0.22 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 12 0.22 (1,1303) 1:A:64:LEU:HB2 1:A:31:LEU:HB3 18 0.22 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 14 0.22 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:L | (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:H | 26 | 0.23 |
| (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 30 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD11 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD12 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,394) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:59:ARG:HD3 12 0.22 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 12 0.22 (1,1303) 1:A:64:LEU:HB2 1:A:31:LEU:HB3 18 0.22 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 14 0.22 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 20 0.21 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 20 0.21 | (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:H | 26 | 0.23 |
| (1,502) 1:A:19:ILE:HD11 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD12 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 12 0.22 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 12 0.22 (1,1303) 1:A:64:LEU:HB2 1:A:31:LEU:HB3 18 0.22 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 14 0.22 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 20 0.21 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 20 0.21 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 20 0.21 | (1,774) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HG3 | 16 | 0.22 |
| (1,502) 1:A:19:ILE:HD12 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,502) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 12 0.22 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 12 0.22 (1,1303) 1:A:64:LEU:HB2 1:A:31:LEU:HB3 18 0.22 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 14 0.22 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 20 0.21 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 20 0.21 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 20 0.21 | (1,700) | 1:A:59:ARG:HA | 1:A:62:ARG:HD2 | 30 | 0.22 |
| (1,502) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:25:ILE:HG13 7 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,394) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:59:ARG:HD2 12 0.22 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 12 0.22 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:31:LEU:HB3 18 0.22 (1,1303) 1:A:64:LEU:HB2 1:A:31:LEU:HB3 18 0.22 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 14 0.22 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 20 0.21 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 20 0.21 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 20 0.21 | (1,502) | 1:A:19:ILE:HD11 | 1:A:25:ILE:HG13 | 7 | 0.22 |
| (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 12 0.22 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 12 0.22 (1,1303) 1:A:64:LEU:HB2 1:A:31:LEU:HB3 18 0.22 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 14 0.22 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 20 0.21 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 20 0.21 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 20 0.21 | (1,502) | 1:A:19:ILE:HD12 | 1:A:25:ILE:HG13 | 7 | 0.22 |
| (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 12 0.22 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 12 0.22 (1,1303) 1:A:64:LEU:HB2 1:A:31:LEU:HB3 18 0.22 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 14 0.22 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 20 0.21 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 20 0.21 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 20 0.21 | (1,502) | 1:A:19:ILE:HD13 | 1:A:25:ILE:HG13 | 7 | 0.22 |
| (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 9 0.22 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 12 0.22 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 12 0.22 (1,1303) 1:A:64:LEU:HB2 1:A:31:LEU:HB3 18 0.22 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 14 0.22 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 20 0.21 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 20 0.21 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 20 0.21 | (1,394) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:25:ILE:HG13 | 9 | 0.22 |
| (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 12 0.22 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 12 0.22 (1,1303) 1:A:64:LEU:HB2 1:A:31:LEU:HB3 18 0.22 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 14 0.22 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 20 0.21 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 20 0.21 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 20 0.21 | (1,394) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:25:ILE:HG13 | 9 | 0.22 |
| (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 12 0.22 (1,1303) 1:A:64:LEU:HB2 1:A:31:LEU:HB3 18 0.22 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 14 0.22 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 20 0.21 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 20 0.21 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 20 0.21 | (1,394) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:25:ILE:HG13 | 9 | 0.22 |
| (1,1303) 1:A:64:LEU:HB2 1:A:31:LEU:HB3 18 0.22 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 14 0.22 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 20 0.21 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 20 0.21 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 20 0.21 | (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 12 | 0.22 |
| (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 14 0.22 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 20 0.21 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 20 0.21 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 20 0.21 | (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 12 | 0.22 |
| (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD21 20 0.21 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 20 0.21 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 20 0.21 | (1,1303) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:31:LEU:HB3 | 18 | 0.22 |
| (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD22 20 0.21 (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 20 0.21 | (1,1271) | 1:A:62:ARG:HA | 1:A:58:ILE:HG12 | 14 | 0.22 |
| (1,994) 1:A:33:ASP:HA 1:A:34:LEU:HD23 20 0.21 | (1,994) | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD21 | 20 | 0.21 |
| | (1,994) | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD22 | 20 | 0.21 |
| (1.052) 1. A.11.TVC.HC2 1. A.11.TVC.H 0 0.21 | (1,994) | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD23 | 20 | 0.21 |
| (1,992) TA:TI:D15:TG2 T:A:TI:D15:T 8 0.21 | (1,952) | 1:A:11:LYS:HG2 | 1:A:11:LYS:H | 8 | 0.21 |
| (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB2 18 0.21 | (1,844) | 1:A:8:ASP:HB3 | 1:A:11:LYS:HB2 | 18 | 0.21 |
| (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB3 18 0.21 | (1,844) | 1:A:8:ASP:HB3 | 1:A:11:LYS:HB3 | 18 | 0.21 |
| (1,475) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:20:ARG:HB2 13 0.21 | (1,475) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:20:ARG:HB2 | 13 | 0.21 |
| (1,475) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:20:ARG:HB2 13 0.21 | (1,475) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:20:ARG:HB2 | 13 | 0.21 |
| (1,475) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 13 0.21 | (1,475) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:20:ARG:HB2 | 13 | 0.21 |
| (1,475) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:20:ARG:HB2 14 0.21 | (1,475) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:20:ARG:HB2 | 14 | 0.21 |
| (1,475) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:20:ARG:HB2 14 0.21 | (1,475) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:20:ARG:HB2 | 14 | 0.21 |
| (1,475) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 14 0.21 | (1,475) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:20:ARG:HB2 | 14 | 0.21 |
| (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 4 0.21 | (1,394) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:25:ILE:HG13 | 4 | 0.21 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:25:ILE:HG13 | 4 | 0.21 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:25:ILE:HG13 | 4 | 0.21 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 1 | 0.21 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 3 | 0.21 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 8 | 0.21 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 13 | 0.21 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 16 | 0.21 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 24 | 0.21 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 17 | 0.21 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 17 | 0.21 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 17 | 0.21 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 26 | 0.21 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 26 | 0.21 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 26 | 0.21 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:29:SER:HA | 28 | 0.21 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:29:SER:HA | 28 | 0.21 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:29:SER:HA | 28 | 0.21 |
| (1,1327) | 1:A:68:LYS:HD2 | 1:A:71:GLU:HB2 | 11 | 0.21 |
| (1,1327) | 1:A:68:LYS:HD3 | 1:A:71:GLU:HB2 | 11 | 0.21 |
| (1,1302) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:31:LEU:HB3 | 5 | 0.21 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB1 | 16 | 0.21 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB2 | 16 | 0.21 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB3 | 16 | 0.21 |
| (1,1049) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:40:MET:HB3 | 9 | 0.21 |
| (1,1049) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:40:MET:HB3 | 9 | 0.21 |
| (1,1049) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:40:MET:HB3 | 9 | 0.21 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:29:SER:HB2 | 17 | 0.21 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:29:SER:HB2 | 17 | 0.21 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:29:SER:HB2 | 17 | 0.21 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:29:SER:HB2 | 19 | 0.21 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:29:SER:HB2 | 19 | 0.21 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:29:SER:HB2 | 19 | 0.21 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:29:SER:HB2 | 28 | 0.21 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:29:SER:HB2 | 28 | 0.21 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:29:SER:HB2 | 28 | 0.21 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:31:LEU:HA | 19 | 0.21 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:31:LEU:HA | 19 | 0.21 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:31:LEU:HA | 19 | 0.21 |
| (1,927) | 1:A:57:PRO:HG3 | 1:A:56:LEU:HD21 | 20 | 0.2 |
| (1,927) | 1:A:57:PRO:HG3 | 1:A:56:LEU:HD22 | 20 | 0.2 |
| (1,927) | 1:A:57:PRO:HG3 | 1:A:56:LEU:HD23 | 20 | 0.2 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:23:ALA:HA | 1 | 0.2 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|-------------|-----------------|-----------------|-------|-----------------|
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:25:ILE:HA | 1 | 0.2 |
| (1,664) | 1:A:49:GLU:HG2 | 1:A:55:VAL:HG21 | 25 | 0.2 |
| (1,664) | 1:A:49:GLU:HG2 | 1:A:55:VAL:HG22 | 25 | 0.2 |
| (1,664) | 1:A:49:GLU:HG2 | 1:A:55:VAL:HG23 | 25 | 0.2 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:20:ARG:HB2 | 2 | 0.2 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:20:ARG:HB2 | 2 | 0.2 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:20:ARG:HB2 | 2 | 0.2 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:20:ARG:HB2 | 8 | 0.2 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:20:ARG:HB2 | 8 | 0.2 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:20:ARG:HB2 | 8 | 0.2 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:20:ARG:HB2 | 22 | 0.2 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:20:ARG:HB2 | 22 | 0.2 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:20:ARG:HB2 | 22 | 0.2 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 4 | 0.2 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 5 | 0.2 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 6 | 0.2 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 7 | 0.2 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 9 | 0.2 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 11 | 0.2 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 12 | 0.2 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 20 | 0.2 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 21 | 0.2 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 23 | 0.2 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 26 | 0.2 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 27 | 0.2 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 29 | 0.2 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 30 | 0.2 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 11 | 0.2 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 11 | 0.2 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 11 | 0.2 |
| (1,192) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD21 | 24 | 0.2 |
| (1,192) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD22 | 24 | 0.2 |
| (1,192) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD23 | 24 | 0.2 |
| (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 19 | 0.2 |
| (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 19 | 0.2 |
| (1,1584) | 1:A:59:ARG:HG3 | 1:A:58:ILE:H | 15 | 0.2 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:26:ASN:HB3 | 27 | 0.2 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:26:ASN:HB3 | 27 | 0.2 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:26:ASN:HB3 | 27 | 0.2 |
| (1,1548) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:21:ASP:HB2 | 1 | 0.2 |
| (1,1548) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:21:ASP:HB2 | 1 | 0.2 |
| (1,1548) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:21:ASP:HB2 | 1 | 0.2 |
| , , , , , , | | | | od on mort mage |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:46:GLN:HG2 | 20 | 0.2 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:46:GLN:HG2 | 20 | 0.2 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:46:GLN:HG2 | 20 | 0.2 |
| (1,1415) | 1:A:42:VAL:HG11 | 1:A:46:GLN:HE21 | 6 | 0.2 |
| (1,1415) | 1:A:42:VAL:HG12 | 1:A:46:GLN:HE21 | 6 | 0.2 |
| (1,1415) | 1:A:42:VAL:HG13 | 1:A:46:GLN:HE21 | 6 | 0.2 |
| (1,1369) | 1:A:71:GLU:HG2 | 1:A:72:MET:H | 12 | 0.2 |
| (1,1354) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:67:ARG:HD3 | 9 | 0.2 |
| (1,1354) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:67:ARG:HD3 | 9 | 0.2 |
| (1,1354) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:67:ARG:HD3 | 9 | 0.2 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB1 | 13 | 0.2 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB2 | 13 | 0.2 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB3 | 13 | 0.2 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB1 | 17 | 0.2 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB2 | 17 | 0.2 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB3 | 17 | 0.2 |
| (1,1037) | 1:A:36:LEU:HB3 | 1:A:40:MET:HA | 5 | 0.2 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:H | 17 | 0.2 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:H | 17 | 0.2 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:H | 17 | 0.2 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:29:SER:HB2 | 29 | 0.2 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:29:SER:HB2 | 29 | 0.2 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:29:SER:HB2 | 29 | 0.2 |
| (1,700) | 1:A:59:ARG:HA | 1:A:62:ARG:HD2 | 27 | 0.19 |
| (1,571) | 1:A:43:GLU:HB3 | 1:A:44:VAL:HG21 | 18 | 0.19 |
| (1,571) | 1:A:43:GLU:HB3 | 1:A:44:VAL:HG22 | 18 | 0.19 |
| (1,571) | 1:A:43:GLU:HB3 | 1:A:44:VAL:HG23 | 18 | 0.19 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 2 | 0.19 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 10 | 0.19 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 15 | 0.19 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 18 | 0.19 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 19 | 0.19 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 22 | 0.19 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 25 | 0.19 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 28 | 0.19 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HB2 | 4 | 0.19 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HB2 | 4 | 0.19 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HB2 | 4 | 0.19 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD21 | 1:A:36:LEU:HB2 | 4 | 0.19 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD22 | 1:A:36:LEU:HB2 | 4 | 0.19 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD23 | 1:A:36:LEU:HB2 | 4 | 0.19 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:74:SER:H | 6 | 0.19 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:69:LEU:H | 6 | 0.19 |
| (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 16 | 0.19 |
| (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 16 | 0.19 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:46:GLN:HG2 | 21 | 0.19 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:46:GLN:HG2 | 21 | 0.19 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:46:GLN:HG2 | 21 | 0.19 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB1 | 15 | 0.19 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB2 | 15 | 0.19 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB3 | 15 | 0.19 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB1 | 20 | 0.19 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB2 | 20 | 0.19 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB3 | 20 | 0.19 |
| (1,994) | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD21 | 29 | 0.18 |
| (1,994) | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD22 | 29 | 0.18 |
| (1,994) | 1:A:33:ASP:HA | 1:A:34:LEU:HD23 | 29 | 0.18 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:70:GLN:HE21 | 2 | 0.18 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:70:GLN:HE21 | 2 | 0.18 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:70:GLN:HE21 | 2 | 0.18 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:23:ALA:HA | 14 | 0.18 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:25:ILE:HA | 14 | 0.18 |
| (1,779) | 1:A:52:HIS:HB2 | 1:A:6:GLN:HE21 | 7 | 0.18 |
| (1,668) | 1:A:49:GLU:HG2 | 1:A:46:GLN:HA | 19 | 0.18 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD11 | 22 | 0.18 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD12 | 22 | 0.18 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD13 | 22 | 0.18 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:25:ILE:HG13 | 29 | 0.18 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:25:ILE:HG13 | 29 | 0.18 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:25:ILE:HG13 | 29 | 0.18 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:32:ALA:HA | 24 | 0.18 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:32:ALA:HA | 24 | 0.18 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:32:ALA:HA | 24 | 0.18 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:50:ARG:HA | 24 | 0.18 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:50:ARG:HA | 24 | 0.18 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:50:ARG:HA | 24 | 0.18 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 14 | 0.18 |
| (1,323) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:45:ARG:HG2 | 17 | 0.18 |
| (1,316) | 1:A:40:MET:HB2 | 1:A:39:LEU:HD21 | 8 | 0.18 |
| (1,316) | 1:A:40:MET:HB2 | 1:A:39:LEU:HD22 | 8 | 0.18 |
| (1,316) | 1:A:40:MET:HB2 | 1:A:39:LEU:HD23 | 8 | 0.18 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HB2 | 16 | 0.18 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HB2 | 16 | 0.18 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HB2 | 16 | 0.18 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|-------|---------------|
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD21 | 1:A:36:LEU:HB2 | 16 | 0.18 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD22 | 1:A:36:LEU:HB2 | 16 | 0.18 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD23 | 1:A:36:LEU:HB2 | 16 | 0.18 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HB2 | 22 | 0.18 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HB2 | 22 | 0.18 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HB2 | 22 | 0.18 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD21 | 1:A:36:LEU:HB2 | 22 | 0.18 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD22 | 1:A:36:LEU:HB2 | 22 | 0.18 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD23 | 1:A:36:LEU:HB2 | 22 | 0.18 |
| (1,1698) | 1:A:38:SER:H | 1:A:39:LEU:H | 17 | 0.18 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 6 | 0.18 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB3 | 1:A:64:LEU:H | 6 | 0.18 |
| (1,1584) | 1:A:59:ARG:HG3 | 1:A:58:ILE:H | 13 | 0.18 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:70:GLN:HG3 | 3 | 0.18 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:70:GLN:HG3 | 3 | 0.18 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:70:GLN:HG3 | 3 | 0.18 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:46:GLN:HG2 | 24 | 0.18 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:46:GLN:HG2 | 24 | 0.18 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:46:GLN:HG2 | 24 | 0.18 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB1 | 18 | 0.18 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB2 | 18 | 0.18 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB3 | 18 | 0.18 |
| (1,1071) | 1:A:36:LEU:HG | 1:A:38:SER:H | 18 | 0.18 |
| (1,851) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 13 | 0.17 |
| (1,851) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 13 | 0.17 |
| (1,851) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 13 | 0.17 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:69:LEU:H | 20 | 0.17 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:69:LEU:H | 20 | 0.17 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:69:LEU:H | 20 | 0.17 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:69:LEU:H | 22 | 0.17 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:69:LEU:H | 22 | 0.17 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:69:LEU:H | 22 | 0.17 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:69:LEU:H | 29 | 0.17 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:69:LEU:H | 29 | 0.17 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:69:LEU:H | 29 | 0.17 |
| (1,662) | 1:A:49:GLU:HA | 1:A:46:GLN:HA | 5 | 0.17 |
| (1,662) | 1:A:49:GLU:HA | 1:A:46:GLN:HA | 8 | 0.17 |
| (1,549) | 1:A:72:MET:HB2 | 1:A:72:MET:H | 13 | 0.17 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:20:ARG:HB2 | 5 | 0.17 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:20:ARG:HB2 | 5 | 0.17 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:20:ARG:HB2 | 5 | 0.17 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:20:ARG:HB2 | 17 | 0.17 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|-------|---------------|
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:20:ARG:HB2 | 17 | 0.17 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:20:ARG:HB2 | 17 | 0.17 |
| (1,240) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:34:LEU:HB2 | 5 | 0.17 |
| (1,240) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:34:LEU:HB2 | 5 | 0.17 |
| (1,240) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:34:LEU:HB2 | 5 | 0.17 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:74:SER:H | 13 | 0.17 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:69:LEU:H | 13 | 0.17 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 6 | 0.17 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 6 | 0.17 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 6 | 0.17 |
| (1,171) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:21:ASP:HA | 23 | 0.17 |
| (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 17 | 0.17 |
| (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 17 | 0.17 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 27 | 0.17 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB3 | 1:A:64:LEU:H | 27 | 0.17 |
| (1,1548) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:21:ASP:HB2 | 10 | 0.17 |
| (1,1548) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:21:ASP:HB2 | 10 | 0.17 |
| (1,1548) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:21:ASP:HB2 | 10 | 0.17 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:46:GLN:HG2 | 27 | 0.17 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:46:GLN:HG2 | 27 | 0.17 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:46:GLN:HG2 | 27 | 0.17 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB1 | 7 | 0.17 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB2 | 7 | 0.17 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB3 | 7 | 0.17 |
| (1,1133) | 1:A:53:ASP:HA | 1:A:53:ASP:H | 19 | 0.17 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:H | 24 | 0.17 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:H | 24 | 0.17 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:H | 24 | 0.17 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 13 | 0.16 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 13 | 0.16 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 13 | 0.16 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:23:ALA:HA | 9 | 0.16 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:25:ILE:HA | 9 | 0.16 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:69:LEU:H | 2 | 0.16 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:69:LEU:H | 2 | 0.16 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:69:LEU:H | 2 | 0.16 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:69:LEU:H | 4 | 0.16 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:69:LEU:H | 4 | 0.16 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:69:LEU:H | 4 | 0.16 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:69:LEU:H | 8 | 0.16 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:69:LEU:H | 8 | 0.16 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:69:LEU:H | 8 | 0.16 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,549) | 1:A:72:MET:HB2 | 1:A:72:MET:H | 24 | 0.16 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:20:ARG:HB2 | 6 | 0.16 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:20:ARG:HB2 | 6 | 0.16 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:20:ARG:HB2 | 6 | 0.16 |
| (1,20) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:19:ILE:HD11 | 14 | 0.16 |
| (1,20) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:19:ILE:HD12 | 14 | 0.16 |
| (1,20) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:19:ILE:HD13 | 14 | 0.16 |
| (1,20) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:69:LEU:HD21 | 14 | 0.16 |
| (1,20) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:69:LEU:HD22 | 14 | 0.16 |
| (1,20) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:69:LEU:HD23 | 14 | 0.16 |
| (1,20) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:27:LEU:HD21 | 14 | 0.16 |
| (1,20) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:27:LEU:HD22 | 14 | 0.16 |
| (1,20) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:27:LEU:HD23 | 14 | 0.16 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 3 | 0.16 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB3 | 1:A:64:LEU:H | 3 | 0.16 |
| (1,1415) | 1:A:42:VAL:HG11 | 1:A:46:GLN:HE21 | 15 | 0.16 |
| (1,1415) | 1:A:42:VAL:HG12 | 1:A:46:GLN:HE21 | 15 | 0.16 |
| (1,1415) | 1:A:42:VAL:HG13 | 1:A:46:GLN:HE21 | 15 | 0.16 |
| (1,1394) | 1:A:44:VAL:HA | 1:A:44:VAL:HG11 | 18 | 0.16 |
| (1,1394) | 1:A:44:VAL:HA | 1:A:44:VAL:HG12 | 18 | 0.16 |
| (1,1394) | 1:A:44:VAL:HA | 1:A:44:VAL:HG13 | 18 | 0.16 |
| (1,1327) | 1:A:68:LYS:HD2 | 1:A:71:GLU:HB2 | 6 | 0.16 |
| (1,1327) | 1:A:68:LYS:HD3 | 1:A:71:GLU:HB2 | 6 | 0.16 |
| (1,1314) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:68:LYS:HD2 | 12 | 0.16 |
| (1,1314) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:68:LYS:HD3 | 12 | 0.16 |
| (1,1314) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:68:LYS:HD2 | 12 | 0.16 |
| (1,1314) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:68:LYS:HD3 | 12 | 0.16 |
| (1,1314) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:68:LYS:HD2 | 12 | 0.16 |
| (1,1314) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:68:LYS:HD3 | 12 | 0.16 |
| (1,851) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 6 | 0.15 |
| (1,851) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 6 | 0.15 |
| (1,851) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 6 | 0.15 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:23:ALA:HA | 30 | 0.15 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:25:ILE:HA | 30 | 0.15 |
| (1,704) | 1:A:59:ARG:HB2 | 1:A:59:ARG:H | 9 | 0.15 |
| (1,704) | 1:A:59:ARG:HB2 | 1:A:59:ARG:H | 12 | 0.15 |
| (1,704) | 1:A:59:ARG:HB2 | 1:A:59:ARG:H | 14 | 0.15 |
| (1,502) | 1:A:19:ILE:HD11 | 1:A:25:ILE:HG13 | 9 | 0.15 |
| (1,502) | 1:A:19:ILE:HD12 | 1:A:25:ILE:HG13 | 9 | 0.15 |
| (1,502) | 1:A:19:ILE:HD13 | 1:A:25:ILE:HG13 | 9 | 0.15 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:20:ARG:HB2 | 16 | 0.15 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:20:ARG:HB2 | 16 | 0.15 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:20:ARG:HB2 | 16 | 0.15 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:25:ILE:HG13 | 6 | 0.15 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:25:ILE:HG13 | 6 | 0.15 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:25:ILE:HG13 | 6 | 0.15 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:32:ALA:HA | 20 | 0.15 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:32:ALA:HA | 20 | 0.15 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:32:ALA:HA | 20 | 0.15 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:50:ARG:HA | 20 | 0.15 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:50:ARG:HA | 20 | 0.15 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:50:ARG:HA | 20 | 0.15 |
| (1,1727) | 1:A:86:LYS:H | 1:A:85:PRO:HA | 5 | 0.15 |
| (1,1698) | 1:A:38:SER:H | 1:A:39:LEU:H | 30 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:59:ARG:HG3 | 1:A:58:ILE:H | 16 | 0.15 |
| (1,1569) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:70:GLN:HB2 | 7 | 0.15 |
| (1,1569) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:70:GLN:HB3 | 7 | 0.15 |
| (1,1569) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:70:GLN:HB2 | 7 | 0.15 |
| (1,1569) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:70:GLN:HB3 | 7 | 0.15 |
| (1,1569) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:70:GLN:HB2 | 7 | 0.15 |
| (1,1569) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:70:GLN:HB3 | 7 | 0.15 |
| (1,1327) | 1:A:68:LYS:HD2 | 1:A:71:GLU:HB2 | 19 | 0.15 |
| (1,1327) | 1:A:68:LYS:HD3 | 1:A:71:GLU:HB2 | 19 | 0.15 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:51:GLU:HB2 | 18 | 0.15 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:51:GLU:HB2 | 18 | 0.15 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:51:GLU:HB2 | 18 | 0.15 |
| (1,1091) | 1:A:39:LEU:HD11 | 1:A:39:LEU:HA | 12 | 0.15 |
| (1,1091) | 1:A:39:LEU:HD12 | 1:A:39:LEU:HA | 12 | 0.15 |
| (1,1091) | 1:A:39:LEU:HD13 | 1:A:39:LEU:HA | 12 | 0.15 |
| (1,1061) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:38:SER:H | 7 | 0.15 |
| (1,1061) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:38:SER:H | 7 | 0.15 |
| (1,1061) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:38:SER:H | 7 | 0.15 |
| (1,1037) | 1:A:36:LEU:HB3 | 1:A:40:MET:HA | 29 | 0.15 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:H | 14 | 0.15 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:H | 14 | 0.15 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:H | 14 | 0.15 |
| (1,845) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HB2 | 14 | 0.14 |
| (1,845) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HB3 | 14 | 0.14 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD11 | 9 | 0.14 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD12 | 9 | 0.14 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD13 | 9 | 0.14 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD21 | 9 | 0.14 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD22 | 9 | 0.14 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD23 | 9 | 0.14 |



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

| (1,83) 1:A:73:SER:HB3 1:A:54:LEU:HD21 9 0.14 (1,83) 1:A:73:SER:HB3 1:A:54:LEU:HD22 9 0.14 (1,83) 1:A:73:SER:HB3 1:A:54:LEU:HD23 9 0.14 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 6 0.14 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 6 0.14 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 6 0.14 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 6 0.14 (1,704) 1:A:59:ARG:HB2 1:A:59:ARG:H 19 0.14 (1,475) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:20:ARG:HB2 18 0.14 (1,475) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:20:ARG:HB2 18 0.14 (1,475) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 18 0.14 (1,475) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 18 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 6 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 6 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 6 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 1 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 2 1 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 2 1 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 2 1 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 2 0 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD12 2 0 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD12 2 0 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497 | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|--|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,83) 1:A:73:SER:HB3 1:A:54:LEU:HD23 9 0.14 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 6 0.14 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 6 0.14 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 6 0.14 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 6 0.14 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 6 0.14 (1,704) 1:A:59:ARG:HB2 1:A:59:ARG:H 19 0.14 (1,704) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:20:ARG:HB2 18 0.14 (1,475) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:20:ARG:HB2 18 0.14 (1,475) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 18 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 6 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 6 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 10.14 (1,1564) 1:A:66:LEU:HD13 10.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:65:THR:HA 18 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 13 (1,1494) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 9 (1,1444) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 9 (1,1444) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 9 (1,1444) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 9 (1,1476) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 13 (1,1476) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 13 (1,1476) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 13 (1,1476) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 13 | (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 9 | 0.14 |
| (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 6 0.14 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 6 0.14 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 6 0.14 (1,704) 1:A:59:ARG:HB2 1:A:59:ARG:H 19 0.14 (1,475) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:20:ARG:HB2 18 0.14 (1,475) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:20:ARG:HB2 18 0.14 (1,475) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:20:ARG:HB2 18 0.14 (1,475) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 18 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 6 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 6 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 6 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 6 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 20 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 30 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:34:LEU:HD22 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 20 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1494) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1494) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1494) 1:A:14:A | (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 9 | 0.14 |
| (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 6 0.14 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 6 0.14 (1,704) 1:A:59:ARG:HB2 1:A:59:ARG:H 19 0.14 (1,475) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:20:ARG:HB2 18 0.14 (1,475) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 18 0.14 (1,475) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 18 0.14 (1,475) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 18 0.14 (1,476) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 6 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 6 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 | (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 9 | 0.14 |
| (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:ARG:H 19 0.14 (1,704) 1:A:59:ARG:HB2 1:A:59:ARG:H 19 0.14 (1,475) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:20:ARG:HB2 18 0.14 (1,475) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:20:ARG:HB2 18 0.14 (1,475) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 18 0.14 (1,475) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 18 0.14 (1,475) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 18 0.14 (1,475) 1:A:32:ALA:HA 1:A:32:ALC:HB01 6 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 6 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 <td>(1,813)</td> <td>1:A:65:THR:HG21</td> <td>1:A:69:LEU:H</td> <td>6</td> <td>0.14</td> | (1,813) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:69:LEU:H | 6 | 0.14 |
| (1,704) 1:A:59:ARG:HB2 1:A:59:ARG:H 19 0.14 (1,475) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:20:ARG:HB2 18 0.14 (1,475) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:20:ARG:HB2 18 0.14 (1,475) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 18 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 6 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 6 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 6 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 10.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD12 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 20 0.14 (1,1554) 1:A:59:ARG:HG3 1:A:35:LE:H 12 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1476) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1476) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1476) 1:A:12:ALA: | (1,813) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:69:LEU:H | 6 | 0.14 |
| (1,475) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:20:ARG:HB2 18 0.14 (1,475) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:20:ARG:HB2 18 0.14 (1,475) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 18 0.14 (1,475) 1:A:32:ALA:HD23 1:A:20:ARG:HB2 18 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 6 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 6 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 6 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 1 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 1 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD12 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 20 0.14 (1,1584) 1:A:59:ARG:HG3 1:A:34:LEU:HD22 20 0.14 (1,1584) 1:A:59:ARG:HG3 1:A:58:ILE:H 12 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1484) 1:A:14:A | (1,813) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:69:LEU:H | 6 | 0.14 |
| (1,475) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:20:ARG:HB2 18 0.14 (1,475) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 18 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 6 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 6 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 6 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 30 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD12 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 20 0.14 (1,1584) 1:A:59:ARG:HG3 1:A:58:ILE:H 12 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB | (1,704) | 1:A:59:ARG:HB2 | 1:A:59:ARG:H | 19 | 0.14 |
| (1,475) | (1,475) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:20:ARG:HB2 | 18 | 0.14 |
| (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 6 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 6 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 6 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 30 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD13 30 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 | (1,475) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:20:ARG:HB2 | 18 | 0.14 |
| (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 6 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 6 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 30 0.14 (1,264) 1:A:32:PSER:HB3 1:A:34:LEU:HD13 30 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 <td>(1,475)</td> <td>1:A:22:LEU:HD23</td> <td>1:A:20:ARG:HB2</td> <td>18</td> <td>0.14</td> | (1,475) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:20:ARG:HB2 | 18 | 0.14 |
| (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 6 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 30 0.14 (1,264) 1:A:32:EE:HB3 1:A:34:LEU:HD21 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 20 0.14 (1,1584) 1:A:59:ARG:HB3 1:A:36:LE:H | (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 6 | 0.14 |
| (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 30 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 20 0.14 (1,1584) 1:A:59:ARG:HG3 1:A:58:ILE:H 12 0.14 (1,1584) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA </td <td>(1,264)</td> <td>1:A:32:ALA:HA</td> <td>1:A:34:LEU:HD12</td> <td>6</td> <td>0.14</td> | (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 6 | 0.14 |
| (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 30 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 20 0.14 (1,1584) 1:A:59:ARG:HG3 1:A:58:ILE:H 12 0.14 (1,1584) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA< | (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 6 | 0.14 |
| (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 7 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 30 0.14 (1,264) 1:A:32:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:58:ILE:H 12 0.14 (1,1584) 1:A:59:ARG:HG3 1:A:58:ILE:H 12 0.14 (1,1584) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA< | (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 7 | 0.14 |
| (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 30 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:35:LE:H 12 0.14 (1,192) 1:A:59:ARG:HG3 1:A:58:ILE:H 12 0.14 (1,1584) 1:A:59:ARG:HG3 1:A:58:ILE:H 12 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA <td>(1,264)</td> <td>1:A:32:ALA:HA</td> <td>1:A:34:LEU:HD12</td> <td>7</td> <td>0.14</td> | (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 7 | 0.14 |
| (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 30 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 20 0.14 (1,192) 1:A:59:ARG:HG3 1:A:58:ILE:H 12 0.14 (1,1584) 1:A:59:ARG:HG3 1:A:58:ILE:H 23 0.14 (1,1584) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR: | (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 7 | 0.14 |
| (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 21 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 30 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:35:ILE:H 12 0.14 (1,1584) 1:A:59:ARG:HG3 1:A:58:ILE:H 12 0.14 (1,1584) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN | (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 21 | 0.14 |
| (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 30 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:58:ILE:H 12 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:58:ILE:H 12 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:58:ILE:H 12 0.14 (1,1584) 1:A:29:SER:HB3 1:A:58:ILE:H 12 0.14 (1,1584) 1:A:59:ARG:HG3 1:A:58:ILE:H 12 0.14 (1,1584) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA <td>(1,264)</td> <td>1:A:32:ALA:HA</td> <td>1:A:34:LEU:HD12</td> <td>21</td> <td>0.14</td> | (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 21 | 0.14 |
| (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 30 0.14 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 30 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 20 0.14 (1,1584) 1:A:59:ARG:HG3 1:A:58:ILE:H 12 0.14 (1,1584) 1:A:59:ARG:HG3 1:A:58:ILE:H 23 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:6 | (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 21 | 0.14 |
| (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 30 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 20 0.14 (1,1584) 1:A:59:ARG:HG3 1:A:58:ILE:H 12 0.14 (1,1584) 1:A:59:ARG:HG3 1:A:58:ILE:H 23 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:6 | (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 30 | 0.14 |
| (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 20 0.14 (1,1584) 1:A:59:ARG:HG3 1:A:58:ILE:H 12 0.14 (1,1584) 1:A:59:ARG:HG3 1:A:58:ILE:H 23 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A: | (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 30 | 0.14 |
| (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 20 0.14 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 20 0.14 (1,1584) 1:A:59:ARG:HG3 1:A:58:ILE:H 12 0.14 (1,1584) 1:A:59:ARG:HG3 1:A:58:ILE:H 23 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A | (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 30 | 0.14 |
| (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 20 0.14 (1,1584) 1:A:59:ARG:HG3 1:A:58:ILE:H 12 0.14 (1,1584) 1:A:59:ARG:HG3 1:A:58:ILE:H 23 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:1 | (1,192) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD21 | 20 | 0.14 |
| (1,1584) 1:A:59:ARG:HG3 1:A:58:ILE:H 12 0.14 (1,1584) 1:A:59:ARG:HG3 1:A:58:ILE:H 23 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD2 5 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 | (1,192) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD22 | 20 | 0.14 |
| (1,1584) 1:A:59:ARG:HG3 1:A:58:ILE:H 23 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD2 5 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:A | (1,192) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD23 | 20 | 0.14 |
| (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD2 5 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A: | (1,1584) | 1:A:59:ARG:HG3 | 1:A:58:ILE:H | 12 | 0.14 |
| (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD2 5 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD3 5 0.14 | (1,1584) | 1:A:59:ARG:HG3 | 1:A:58:ILE:H | 23 | 0.14 |
| (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 14 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD2 5 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD3 5 0.14 | (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:65:THR:HA | 14 | 0.14 |
| (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD2 5 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD3 5 0.14 | (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:65:THR:HA | 14 | 0.14 |
| (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD2 5 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD3 5 0.14 | (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:65:THR:HA | 14 | 0.14 |
| (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 18 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD2 5 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD3 5 0.14 | (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:65:THR:HA | 18 | 0.14 |
| (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD2 5 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD3 5 0.14 | (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:65:THR:HA | 18 | 0.14 |
| (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD2 5 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD3 5 0.14 | · · / | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:65:THR:HA | 18 | 0.14 |
| (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD2 5 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD3 5 0.14 | , , | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:63:GLN:HB2 | 13 | 0.14 |
| (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 13 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD2 5 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD3 5 0.14 | · · / | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:63:GLN:HB2 | 13 | 0.14 |
| (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD2 5 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD3 5 0.14 | , , | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:63:GLN:HB2 | 13 | 0.14 |
| (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD2 5 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD3 5 0.14 | · · / | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:19:ILE:HB | 9 | 0.14 |
| (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 9 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD2 5 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD3 5 0.14 | · · / | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:19:ILE:HB | 9 | 0.14 |
| (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD2 5 0.14 (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD3 5 0.14 | _ ` ' | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:19:ILE:HB | 9 | 0.14 |
| (1,1376) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HD3 5 0.14 | | 1:A:12:ALA:HB1 | 1:A:7:ARG:HD2 | 5 | 0.14 |
| | (1,1376) | 1:A:12:ALA:HB1 | 1:A:7:ARG:HD3 | 5 | 0.14 |
| | · / | 1:A:12:ALA:HB2 | | 5 | |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1376) | 1:A:12:ALA:HB2 | 1:A:7:ARG:HD3 | 5 | 0.14 |
| (1,1376) | 1:A:12:ALA:HB3 | 1:A:7:ARG:HD2 | 5 | 0.14 |
| (1,1376) | 1:A:12:ALA:HB3 | 1:A:7:ARG:HD3 | 5 | 0.14 |
| (1,1369) | 1:A:71:GLU:HG2 | 1:A:72:MET:H | 7 | 0.14 |
| (1,1327) | 1:A:68:LYS:HD2 | 1:A:71:GLU:HB2 | 18 | 0.14 |
| (1,1327) | 1:A:68:LYS:HD3 | 1:A:71:GLU:HB2 | 18 | 0.14 |
| (1,1308) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:63:GLN:HE21 | 16 | 0.14 |
| (1,1263) | 1:A:61:VAL:HG11 | 1:A:62:ARG:HB3 | 4 | 0.14 |
| (1,1263) | 1:A:61:VAL:HG12 | 1:A:62:ARG:HB3 | 4 | 0.14 |
| (1,1263) | 1:A:61:VAL:HG13 | 1:A:62:ARG:HB3 | 4 | 0.14 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD21 | 17 | 0.14 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD22 | 17 | 0.14 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD23 | 17 | 0.14 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD21 | 26 | 0.14 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD22 | 26 | 0.14 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD23 | 26 | 0.14 |
| (1,1061) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:38:SER:H | 11 | 0.14 |
| (1,1061) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:38:SER:H | 11 | 0.14 |
| (1,1061) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:38:SER:H | 11 | 0.14 |
| (1,1037) | 1:A:36:LEU:HB3 | 1:A:40:MET:HA | 21 | 0.14 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:H | 20 | 0.14 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:H | 20 | 0.14 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:H | 20 | 0.14 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:43:GLU:H | 23 | 0.13 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG22 | 1:A:43:GLU:H | 23 | 0.13 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG23 | 1:A:43:GLU:H | 23 | 0.13 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:42:VAL:H | 23 | 0.13 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG22 | 1:A:42:VAL:H | 23 | 0.13 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG23 | 1:A:42:VAL:H | 23 | 0.13 |
| (1,9) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:50:ARG:HE | 23 | 0.13 |
| (1,9) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:50:ARG:HE | 23 | 0.13 |
| (1,9) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:50:ARG:HE | 23 | 0.13 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:23:ALA:HA | 12 | 0.13 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:25:ILE:HA | 12 | 0.13 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:23:ALA:HA | 18 | 0.13 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:25:ILE:HA | 18 | 0.13 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:69:LEU:H | 1 | 0.13 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:69:LEU:H | 1 | 0.13 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:69:LEU:H | 1 | 0.13 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:69:LEU:H | 3 | 0.13 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:69:LEU:H | 3 | 0.13 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:69:LEU:H | 3 | 0.13 |



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

| (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 5 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 5 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 5 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 7 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 7 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 28 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 28 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 28 | 0.13 0.13 0.13 0.13 0.13 0.13 0.13 0.13 0.13 |
|--|--|
| (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 5 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 7 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 7 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 7 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 28 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 28 | 0.13 0.13 0.13 0.13 0.13 0.13 |
| (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 7 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 7 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 7 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 28 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 28 | 0.13 0.13 0.13 0.13 0.13 |
| (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 7 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 7 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 28 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 28 | 0.13 0.13 0.13 0.13 |
| (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 7 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 28 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 28 | 0.13 0.13 0.13 |
| (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 28 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 28 | 0.13 0.13 |
| (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 28 | 0.13 |
| () / | |
| (1.012) 1.A.C.T.IID.IIC02 1.A.C.O.I.III 11 00 | 0.13 |
| (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 28 | |
| (1,72) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 30 | 0.13 |
| (1,72) 1:A:48:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 30 | 0.13 |
| (1,72) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 30 | 0.13 |
| (1,72) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:6:GLN:HE21 30 | 0.13 |
| (1,72) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:6:GLN:HE21 30 | 0.13 |
| (1,72) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:6:GLN:HE21 30 | 0.13 |
| (1,549) 1:A:72:MET:HB2 1:A:72:MET:H 8 | 0.13 |
| (1,54) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HD3 25 | 0.13 |
| (1,54) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:10:VAL:HA 25 | 0.13 |
| (1,54) 1:A:7:ARG:HG2 1:A:10:VAL:HA 25 | 0.13 |
| (1,54) 1:A:7:ARG:HG3 1:A:10:VAL:HA 25 | 0.13 |
| (1,479) 1:A:23:ALA:HA 1:A:21:ASP:HA 19 | 0.13 |
| (1,469) 1:A:17:LEU:HD11 1:A:16:ILE:H 7 | 0.13 |
| (1,469) 1:A:17:LEU:HD12 1:A:16:ILE:H 7 | 0.13 |
| (1,469) 1:A:17:LEU:HD13 1:A:16:ILE:H 7 | 0.13 |
| (1,291) 1:A:17:LEU:HG 1:A:17:LEU:H 7 | 0.13 |
| (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 12 | 0.13 |
| (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 12 | 0.13 |
| (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 12 | 0.13 |
| (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 29 | 0.13 |
| (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 29 | 0.13 |
| (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 29 | 0.13 |
| (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 27 | 0.13 |
| (1,1727) 1:A:86:LYS:H 1:A:85:PRO:HA 22 | 0.13 |
| (1,1638) 1:A:57:PRO:HB3 1:A:59:ARG:HB2 9 | 0.13 |
| (1,1595) 1:A:68:LYS:HB2 1:A:64:LEU:H 10 | 0.13 |
| (1,1595) 1:A:68:LYS:HB3 1:A:64:LEU:H 10 | 0.13 |
| (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 1 | 0.13 |
| (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 1 | 0.13 |
| (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 1 | 0.13 |
| (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 4 | 0.13 |
| (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 4 | 0.13 |
| (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 4 | 0.13 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:19:ILE:HB | 12 | 0.13 |
| | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:19:ILE:HB | 12 | 0.13 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:19:ILE:HB | 12 | 0.13 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:19:ILE:HB | 18 | 0.13 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:19:ILE:HB | 18 | 0.13 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:19:ILE:HB | 18 | 0.13 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:19:ILE:HB | 25 | 0.13 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:19:ILE:HB | 25 | 0.13 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:19:ILE:HB | 25 | 0.13 |
| (1,1263) | 1:A:61:VAL:HG11 | 1:A:62:ARG:HB3 | 18 | 0.13 |
| (1,1263) | 1:A:61:VAL:HG12 | 1:A:62:ARG:HB3 | 18 | 0.13 |
| (1,1263) | 1:A:61:VAL:HG13 | 1:A:62:ARG:HB3 | 18 | 0.13 |
| (1,1107) | 1:A:48:LEU:HA | 1:A:52:HIS:HB2 | 17 | 0.13 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG21 | 18 | 0.13 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG22 | 18 | 0.13 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG23 | 18 | 0.13 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG21 | 18 | 0.13 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG22 | 18 | 0.13 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG23 | 18 | 0.13 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG21 | 18 | 0.13 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG22 | 18 | 0.13 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG23 | 18 | 0.13 |
| (1,1037) | 1:A:36:LEU:HB3 | 1:A:40:MET:HA | 6 | 0.13 |
| (1,1037) | 1:A:36:LEU:HB3 | 1:A:40:MET:HA | 26 | 0.13 |
| (1,1037) | 1:A:36:LEU:HB3 | 1:A:40:MET:HA | 27 | 0.13 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:31:LEU:HA | 28 | 0.13 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:31:LEU:HA | 28 | 0.13 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:31:LEU:HA | 28 | 0.13 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:70:GLN:HE21 | 21 | 0.12 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:70:GLN:HE21 | 21 | 0.12 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:70:GLN:HE21 | 21 | 0.12 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:23:ALA:HA | 25 | 0.12 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:25:ILE:HA | 25 | 0.12 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:23:ALA:HA | 26 | 0.12 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:25:ILE:HA | 26 | 0.12 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:23:ALA:HA | 28 | 0.12 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:25:ILE:HA | 28 | 0.12 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:69:LEU:H | 10 | 0.12 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:69:LEU:H | 10 | 0.12 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:69:LEU:H | 10 | 0.12 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:69:LEU:H | 12 | 0.12 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:69:LEU:H | 12 | 0.12 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:69:LEU:H | 12 | 0.12 |
| (1,778) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:6:GLN:HE21 | 22 | 0.12 |
| (1,662) | 1:A:49:GLU:HA | 1:A:46:GLN:HA | 10 | 0.12 |
| (1,662) | 1:A:49:GLU:HA | 1:A:46:GLN:HA | 18 | 0.12 |
| (1,662) | 1:A:49:GLU:HA | 1:A:46:GLN:HA | 21 | 0.12 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:21:ASP:HA | 25 | 0.12 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:21:ASP:HA | 25 | 0.12 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:21:ASP:HA | 25 | 0.12 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:32:ALA:HA | 14 | 0.12 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:32:ALA:HA | 14 | 0.12 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:32:ALA:HA | 14 | 0.12 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:50:ARG:HA | 14 | 0.12 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:50:ARG:HA | 14 | 0.12 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:50:ARG:HA | 14 | 0.12 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 2 | 0.12 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 2 | 0.12 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 2 | 0.12 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 18 | 0.12 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 18 | 0.12 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 18 | 0.12 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:62:ARG:HG3 | 9 | 0.12 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:62:ARG:HG3 | 9 | 0.12 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:62:ARG:HG3 | 9 | 0.12 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:62:ARG:HG3 | 29 | 0.12 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:62:ARG:HG3 | 29 | 0.12 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:62:ARG:HG3 | 29 | 0.12 |
| (1,192) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD21 | 3 | 0.12 |
| (1,192) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD22 | 3 | 0.12 |
| (1,192) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD23 | 3 | 0.12 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:74:SER:H | 18 | 0.12 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:69:LEU:H | 18 | 0.12 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:70:GLN:HG3 | 7 | 0.12 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:70:GLN:HG3 | 7 | 0.12 |
| (1,1581) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:70:GLN:HG3 | 7 | 0.12 |
| (1,1569) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:70:GLN:HB2 | 3 | 0.12 |
| (1,1569) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:70:GLN:HB3 | 3 | 0.12 |
| (1,1569) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:70:GLN:HB2 | 3 | 0.12 |
| (1,1569) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:70:GLN:HB3 | 3 | 0.12 |
| (1,1569) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:70:GLN:HB2 | 3 | 0.12 |
| (1,1569) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:70:GLN:HB3 | 3 | 0.12 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:45:ARG:HE | 9 | 0.12 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG22 | 1:A:45:ARG:HE | 9 | 0.12 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|-------|---------------|
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG23 | 1:A:45:ARG:HE | 9 | 0.12 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:19:ILE:HB | 21 | 0.12 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:19:ILE:HB | 21 | 0.12 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:19:ILE:HB | 21 | 0.12 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:19:ILE:HB | 28 | 0.12 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:19:ILE:HB | 28 | 0.12 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:19:ILE:HB | 28 | 0.12 |
| (1,1400) | 1:A:44:VAL:HB | 1:A:45:ARG:HE | 18 | 0.12 |
| (1,1369) | 1:A:71:GLU:HG2 | 1:A:72:MET:H | 5 | 0.12 |
| (1,1327) | 1:A:68:LYS:HD2 | 1:A:71:GLU:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,1327) | 1:A:68:LYS:HD3 | 1:A:71:GLU:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB1 | 5 | 0.12 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB2 | 5 | 0.12 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB3 | 5 | 0.12 |
| (1,1263) | 1:A:61:VAL:HG11 | 1:A:62:ARG:HB3 | 20 | 0.12 |
| (1,1263) | 1:A:61:VAL:HG12 | 1:A:62:ARG:HB3 | 20 | 0.12 |
| (1,1263) | 1:A:61:VAL:HG13 | 1:A:62:ARG:HB3 | 20 | 0.12 |
| (1,1091) | 1:A:39:LEU:HD11 | 1:A:39:LEU:HA | 27 | 0.12 |
| (1,1091) | 1:A:39:LEU:HD12 | 1:A:39:LEU:HA | 27 | 0.12 |
| (1,1091) | 1:A:39:LEU:HD13 | 1:A:39:LEU:HA | 27 | 0.12 |
| (1,1037) | 1:A:36:LEU:HB3 | 1:A:40:MET:HA | 22 | 0.12 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:29:SER:HB2 | 3 | 0.12 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:29:SER:HB2 | 3 | 0.12 |
| (1,1018) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:29:SER:HB2 | 3 | 0.12 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:31:LEU:HA | 19 | 0.12 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:31:LEU:HA | 19 | 0.12 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:31:LEU:HA | 19 | 0.12 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:31:LEU:HA | 21 | 0.12 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:31:LEU:HA | 21 | 0.12 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:31:LEU:HA | 21 | 0.12 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:31:LEU:HA | 30 | 0.12 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:31:LEU:HA | 30 | 0.12 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:31:LEU:HA | 30 | 0.12 |
| (1,1012) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:31:LEU:H | 19 | 0.12 |
| (1,1012) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:31:LEU:H | 19 | 0.12 |
| (1,1012) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:31:LEU:H | 19 | 0.12 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:43:GLU:H | 4 | 0.11 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG22 | 1:A:43:GLU:H | 4 | 0.11 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG23 | 1:A:43:GLU:H | 4 | 0.11 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:42:VAL:H | 4 | 0.11 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG22 | 1:A:42:VAL:H | 4 | 0.11 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG23 | 1:A:42:VAL:H | 4 | 0.11 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,9) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:50:ARG:HE | 4 | 0.11 |
| (1,9) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:50:ARG:HE | 4 | 0.11 |
| (1,9) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:50:ARG:HE | 4 | 0.11 |
| (1,896) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:6:GLN:HE21 | 6 | 0.11 |
| (1,896) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:6:GLN:HE21 | 6 | 0.11 |
| (1,896) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:6:GLN:HE21 | 6 | 0.11 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 8 | 0.11 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 8 | 0.11 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 8 | 0.11 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:23:ALA:HA | 11 | 0.11 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:25:ILE:HA | 11 | 0.11 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:23:ALA:HA | 23 | 0.11 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:25:ILE:HA | 23 | 0.11 |
| (1,841) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:H | 25 | 0.11 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD11 | 19 | 0.11 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD12 | 19 | 0.11 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD13 | 19 | 0.11 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD21 | 19 | 0.11 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD22 | 19 | 0.11 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD23 | 19 | 0.11 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 19 | 0.11 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 19 | 0.11 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 19 | 0.11 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:69:LEU:H | 27 | 0.11 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:69:LEU:H | 27 | 0.11 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:69:LEU:H | 27 | 0.11 |
| (1,806) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:67:ARG:HB2 | 2 | 0.11 |
| (1,806) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:67:ARG:HB3 | 2 | 0.11 |
| (1,806) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:67:ARG:HB2 | 2 | 0.11 |
| (1,806) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:67:ARG:HB3 | 2 | 0.11 |
| (1,806) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:67:ARG:HB2 | 2 | 0.11 |
| (1,806) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:67:ARG:HB3 | 2 | 0.11 |
| (1,704) | 1:A:59:ARG:HB2 | 1:A:59:ARG:H | 7 | 0.11 |
| (1,704) | 1:A:59:ARG:HB2 | 1:A:59:ARG:H | 15 | 0.11 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:25:ILE:HG13 | 3 | 0.11 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:25:ILE:HG13 | 3 | 0.11 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:25:ILE:HG13 | 3 | 0.11 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:21:ASP:HA | 17 | 0.11 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:21:ASP:HA | 17 | 0.11 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:21:ASP:HA | 17 | 0.11 |
| (1,291) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:17:LEU:H | 16 | 0.11 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 8 | 0.11 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 8 | 0.11 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 8 | 0.11 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 20 | 0.11 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 20 | 0.11 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 20 | 0.11 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 22 | 0.11 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 22 | 0.11 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 22 | 0.11 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 25 | 0.11 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 25 | 0.11 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 25 | 0.11 |
| (1,213) | 1:A:30:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HA | 26 | 0.11 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:74:SER:H | 12 | 0.11 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:69:LEU:H | 12 | 0.11 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:74:SER:H | 29 | 0.11 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:69:LEU:H | 29 | 0.11 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 14 | 0.11 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 14 | 0.11 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 14 | 0.11 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG21 | 17 | 0.11 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG22 | 17 | 0.11 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG23 | 17 | 0.11 |
| (1,171) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:21:ASP:HA | 27 | 0.11 |
| (1,1646) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:9:LEU:H | 3 | 0.11 |
| (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 20 | 0.11 |
| (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 20 | 0.11 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:26:ASN:H | 6 | 0.11 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:26:ASN:H | 6 | 0.11 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:26:ASN:H | 6 | 0.11 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:42:VAL:HA | 11 | 0.11 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:42:VAL:HA | 11 | 0.11 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:42:VAL:HA | 11 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:45:ARG:HE | 8 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG22 | 1:A:45:ARG:HE | 8 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG23 | 1:A:45:ARG:HE | 8 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:45:ARG:HE | 15 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG22 | 1:A:45:ARG:HE | 15 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG23 | 1:A:45:ARG:HE | 15 | 0.11 |
| (1,1525) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 13 | 0.11 |
| (1,1525) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 13 | 0.11 |
| (1,1525) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 13 | 0.11 |
| (1,1523) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:70:GLN:H | 3 | 0.11 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|-------|---------------|
| (1,1523) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:70:GLN:H | 22 | 0.11 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD2 | 25 | 0.11 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD3 | 25 | 0.11 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 25 | 0.11 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 25 | 0.11 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD2 | 25 | 0.11 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD3 | 25 | 0.11 |
| (1,1402) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:ARG:HB3 | 15 | 0.11 |
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:69:LEU:H | 20 | 0.11 |
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:69:LEU:H | 20 | 0.11 |
| (1,1327) | 1:A:68:LYS:HD2 | 1:A:71:GLU:HB2 | 15 | 0.11 |
| (1,1327) | 1:A:68:LYS:HD3 | 1:A:71:GLU:HB2 | 15 | 0.11 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB1 | 4 | 0.11 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB2 | 4 | 0.11 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB3 | 4 | 0.11 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB1 | 6 | 0.11 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB2 | 6 | 0.11 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB3 | 6 | 0.11 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB1 | 22 | 0.11 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB2 | 22 | 0.11 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB3 | 22 | 0.11 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB1 | 23 | 0.11 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB2 | 23 | 0.11 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB3 | 23 | 0.11 |
| (1,1037) | 1:A:36:LEU:HB3 | 1:A:40:MET:HA | 2 | 0.11 |
| (1,1037) | 1:A:36:LEU:HB3 | 1:A:40:MET:HA | 3 | 0.11 |
| (1,1037) | 1:A:36:LEU:HB3 | 1:A:40:MET:HA | 28 | 0.11 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:31:LEU:HA | 2 | 0.11 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:31:LEU:HA | 2 | 0.11 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:31:LEU:HA | 2 | 0.11 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:31:LEU:HA | 15 | 0.11 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:31:LEU:HA | 15 | 0.11 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:31:LEU:HA | 15 | 0.11 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:31:LEU:HA | 16 | 0.11 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:31:LEU:HA | 16 | 0.11 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:31:LEU:HA | 16 | 0.11 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:31:LEU:HA | 17 | 0.11 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:31:LEU:HA | 17 | 0.11 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:31:LEU:HA | 17 | 0.11 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:31:LEU:HA | 26 | 0.11 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:31:LEU:HA | 26 | 0.11 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:31:LEU:HA | 26 | 0.11 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|----------------|
| (1,896) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:6:GLN:HE21 | 14 | 0.1 |
| (1,896) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:6:GLN:HE21 | 14 | 0.1 |
| (1,896) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:6:GLN:HE21 | 14 | 0.1 |
| (1,844) | 1:A:8:ASP:HB3 | 1:A:11:LYS:HB2 | 11 | 0.1 |
| (1,844) | 1:A:8:ASP:HB3 | 1:A:11:LYS:HB3 | 11 | 0.1 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:9:LEU:HB3 | 5 | 0.1 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG2 | 5 | 0.1 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG3 | 5 | 0.1 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:9:LEU:HB3 | 21 | 0.1 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG2 | 21 | 0.1 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG3 | 21 | 0.1 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:9:LEU:HB3 | 29 | 0.1 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG2 | 29 | 0.1 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG3 | 29 | 0.1 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:69:LEU:H | 16 | 0.1 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:69:LEU:H | 16 | 0.1 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:69:LEU:H | 16 | 0.1 |
| (1,704) | 1:A:59:ARG:HB2 | 1:A:59:ARG:H | 16 | 0.1 |
| (1,704) | 1:A:59:ARG:HB2 | 1:A:59:ARG:H | 20 | 0.1 |
| (1,704) | 1:A:59:ARG:HB2 | 1:A:59:ARG:H | 23 | 0.1 |
| (1,704) | 1:A:59:ARG:HB2 | 1:A:59:ARG:H | 24 | 0.1 |
| (1,704) | 1:A:59:ARG:HB2 | 1:A:59:ARG:H | 30 | 0.1 |
| (1,549) | 1:A:72:MET:HB2 | 1:A:72:MET:H | 1 | 0.1 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB1 | 29 | 0.1 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB2 | 29 | 0.1 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB3 | 29 | 0.1 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB1 | 29 | 0.1 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB2 | 29 | 0.1 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB3 | 29 | 0.1 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB1 | 29 | 0.1 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB2 | 29 | 0.1 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB3 | 29 | 0.1 |
| (1,491) | 1:A:27:LEU:HA | 1:A:66:LEU:H | 16 | 0.1 |
| (1,479) | 1:A:23:ALA:HA | 1:A:21:ASP:HA | 24 | 0.1 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:20:ARG:HB2 | 4 | 0.1 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:20:ARG:HB2 | 4 | 0.1 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:20:ARG:HB2 | 4 | 0.1 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:25:ILE:HG13 | 28 | 0.1 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:25:ILE:HG13 | 28 | 0.1 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:25:ILE:HG13 | 28 | 0.1 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:21:ASP:HA | 3 | 0.1 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:21:ASP:HA | 3 | 0.1 |
| | | | | d on mort mage |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:21:ASP:HA | 3 | 0.1 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:21:ASP:HA | 5 | 0.1 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:21:ASP:HA | 5 | 0.1 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:21:ASP:HA | 5 | 0.1 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:32:ALA:HA | 9 | 0.1 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:32:ALA:HA | 9 | 0.1 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:32:ALA:HA | 9 | 0.1 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:50:ARG:HA | 9 | 0.1 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:50:ARG:HA | 9 | 0.1 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:50:ARG:HA | 9 | 0.1 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 4 | 0.1 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 4 | 0.1 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 4 | 0.1 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:62:ARG:HG3 | 25 | 0.1 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:62:ARG:HG3 | 25 | 0.1 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:62:ARG:HG3 | 25 | 0.1 |
| (1,213) | 1:A:30:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HA | 11 | 0.1 |
| (1,213) | 1:A:30:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HA | 19 | 0.1 |
| (1,213) | 1:A:30:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HA | 28 | 0.1 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 13 | 0.1 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 13 | 0.1 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 13 | 0.1 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 16 | 0.1 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 16 | 0.1 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 16 | 0.1 |
| (1,171) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:21:ASP:HA | 24 | 0.1 |
| (1,171) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:21:ASP:HA | 28 | 0.1 |
| (1,1701) | 1:A:47:ILE:H | 1:A:48:LEU:H | 14 | 0.1 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:40:MET:HA | 21 | 0.1 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:40:MET:HA | 21 | 0.1 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:40:MET:HA | 21 | 0.1 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:45:ARG:HE | 11 | 0.1 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG22 | 1:A:45:ARG:HE | 11 | 0.1 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG23 | 1:A:45:ARG:HE | 11 | 0.1 |
| (1,1523) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:70:GLN:H | 10 | 0.1 |
| (1,1497) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:63:GLN:HB2 | 14 | 0.1 |
| (1,1497) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:63:GLN:HB2 | 14 | 0.1 |
| (1,1497) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:63:GLN:HB2 | 14 | 0.1 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:19:ILE:HB | 10 | 0.1 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:19:ILE:HB | 10 | 0.1 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:19:ILE:HB | 10 | 0.1 |
| | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:19:ILE:HB | | I |



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

| (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 15 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 15 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 16 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 16 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 23 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 23 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 27 0.3 | 1 1 1 1 1 1 1 |
|---|---------------------------------|
| (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 16 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 16 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 23 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 23 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 27 0.3 | 1 1 1 1 1 1 1 |
| (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 16 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 23 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 23 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 27 0.3 | 1 1 1 1 1 1 |
| (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 23 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 23 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 27 0.3 | 1 1 1 1 1 |
| (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 23 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 23 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 27 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 27 0.3 | 1 1 1 1 |
| (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 23 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.3 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 27 0.3 | 1 1 1 |
| (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 | 1 1 |
| (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 | 1 |
| | |
| | 1 |
| (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 | |
| (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 | 1 |
| (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 | 1 |
| (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 | 1 |
| (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 | 1 |
| (1,1332) 1:A:68:LYS:HE2 1:A:69:LEU:H 4 0.1 | 1 |
| (1,1332) 1:A:68:LYS:HE3 1:A:69:LEU:H 4 0.1 | 1 |
| (1,1071) 1:A:36:LEU:HG 1:A:38:SER:H 13 0.1 | 1 |
| (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 | 1 |
| (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 | 1 |
| (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 | 1 |
| (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 | 1 |
| (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 | 1 |
| (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 | 1 |
| (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 | 1 |
| (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 | 1 |
| (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 | 1 |
| (1,1037) 1:A:36:LEU:HB3 1:A:40:MET:HA 1 0.1 | 1 |
| (1,1037) 1:A:36:LEU:HB3 1:A:40:MET:HA 4 0.1 | 1 |
| (1,1037) 1:A:36:LEU:HB3 1:A:40:MET:HA 10 0.1 | 1 |
| (1,1037) 1:A:36:LEU:HB3 1:A:40:MET:HA 12 0.1 | 1 |
| (1,1037) 1:A:36:LEU:HB3 1:A:40:MET:HA 25 0.1 | 1 |
| (1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 4 0.1 | 1 |
| (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 4 0.3 | 1 |
| (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 4 0.1 | 1 |
| (1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 10 0.3 | 1 |
| (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 10 0.1 | 1 |
| (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 10 0.1 | 1 |
| (1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 29 0.3 | 1 |
| (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 29 0.3 | 1 |
| (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 29 0.3 | 1 |
| (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 10 0.0 | 9 |
| (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H 10 0.0 | 9 |



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

| (1,9) (1,9) | 1:A:16:ILE:HG23 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:43:GLU:H | 10 | 0.00 |
|----------------|------------------------------------|-----------------|----|------|
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG21 | | 10 | 0.09 |
| | | 1:A:42:VAL:H | 10 | 0.09 |
| | 1:A:16:ILE:HG22 | 1:A:42:VAL:H | 10 | 0.09 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG23 | 1:A:42:VAL:H | 10 | 0.09 |
| (1,9) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:50:ARG:HE | 10 | 0.09 |
| (1,9) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:50:ARG:HE | 10 | 0.09 |
| (1,9) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:50:ARG:HE | 10 | 0.09 |
| (1,896) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:6:GLN:HE21 | 17 | 0.09 |
| (1,896) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:6:GLN:HE21 | 17 | 0.09 |
| (1,896) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:6:GLN:HE21 | 17 | 0.09 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:23:ALA:HA | 4 | 0.09 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:25:ILE:HA | 4 | 0.09 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:23:ALA:HA | 6 | 0.09 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:25:ILE:HA | 6 | 0.09 |
| (1,844) | 1:A:8:ASP:HB3 | 1:A:11:LYS:HB2 | 15 | 0.09 |
| (1,844) | 1:A:8:ASP:HB3 | 1:A:11:LYS:HB3 | 15 | 0.09 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:69:LEU:H | 17 | 0.09 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:69:LEU:H | 17 | 0.09 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:69:LEU:H | 17 | 0.09 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:69:LEU:H | 19 | 0.09 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:69:LEU:H | 19 | 0.09 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:69:LEU:H | 19 | 0.09 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:69:LEU:H | 24 | 0.09 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:69:LEU:H | 24 | 0.09 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:69:LEU:H | 24 | 0.09 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:69:LEU:H | 25 | 0.09 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:69:LEU:H | 25 | 0.09 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:69:LEU:H | 25 | 0.09 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:69:LEU:H | 30 | 0.09 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:69:LEU:H | 30 | 0.09 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:69:LEU:H | 30 | 0.09 |
| (1,704) | 1:A:59:ARG:HB2 | 1:A:59:ARG:H | 22 | 0.09 |
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD21 | 5 | 0.09 |
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD22 | 5 | 0.09 |
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD23 | 5 | 0.09 |
| (1,662) | 1:A:49:GLU:HA | 1:A:46:GLN:HA | 27 | 0.09 |
| (1,568) | 1:A:72:MET:HG2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 11 | 0.09 |
| | 1:A:72:MET:HG2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 11 | 0.09 |
| (1,568) | 1:A:72:MET:HG2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 11 | 0.09 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB1 | 16 | 0.09 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB2 | 16 | 0.09 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB3 | 16 | 0.09 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB1 | 16 | 0.09 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB2 | 16 | 0.09 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB3 | 16 | 0.09 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB1 | 16 | 0.09 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB2 | 16 | 0.09 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB3 | 16 | 0.09 |
| (1,479) | 1:A:23:ALA:HA | 1:A:21:ASP:HA | 8 | 0.09 |
| (1,479) | 1:A:23:ALA:HA | 1:A:21:ASP:HA | 10 | 0.09 |
| (1,479) | 1:A:23:ALA:HA | 1:A:21:ASP:HA | 27 | 0.09 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:25:ILE:HG13 | 18 | 0.09 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:25:ILE:HG13 | 18 | 0.09 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:25:ILE:HG13 | 18 | 0.09 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:21:ASP:HA | 2 | 0.09 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:21:ASP:HA | 2 | 0.09 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:21:ASP:HA | 2 | 0.09 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:21:ASP:HA | 26 | 0.09 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:21:ASP:HA | 26 | 0.09 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:21:ASP:HA | 26 | 0.09 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:32:ALA:HA | 17 | 0.09 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:32:ALA:HA | 17 | 0.09 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:32:ALA:HA | 17 | 0.09 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:50:ARG:HA | 17 | 0.09 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:50:ARG:HA | 17 | 0.09 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:50:ARG:HA | 17 | 0.09 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:32:ALA:HA | 19 | 0.09 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:32:ALA:HA | 19 | 0.09 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:32:ALA:HA | 19 | 0.09 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:50:ARG:HA | 19 | 0.09 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:50:ARG:HA | 19 | 0.09 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:50:ARG:HA | 19 | 0.09 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 10 | 0.09 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 10 | 0.09 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 10 | 0.09 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 3 | 0.09 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 3 | 0.09 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 3 | 0.09 |
| (1,192) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD21 | 26 | 0.09 |
| (1,192) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD22 | 26 | 0.09 |
| (1,192) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD23 | 26 | 0.09 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:74:SER:H | 8 | 0.09 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:69:LEU:H | 8 | 0.09 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:74:SER:H | 25 | 0.09 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|-------|---------------|
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:69:LEU:H | 25 | 0.09 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 30 | 0.09 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 30 | 0.09 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 30 | 0.09 |
| (1,171) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:21:ASP:HA | 11 | 0.09 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:9:LEU:HD21 | 3 | 0.09 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:9:LEU:HD22 | 3 | 0.09 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:9:LEU:HD23 | 3 | 0.09 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:9:LEU:HD21 | 3 | 0.09 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:9:LEU:HD22 | 3 | 0.09 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:9:LEU:HD23 | 3 | 0.09 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 16 | 0.09 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB3 | 1:A:64:LEU:H | 16 | 0.09 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 20 | 0.09 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB3 | 1:A:64:LEU:H | 20 | 0.09 |
| (1,1584) | 1:A:59:ARG:HG3 | 1:A:58:ILE:H | 9 | 0.09 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:65:THR:HA | 13 | 0.09 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:65:THR:HA | 13 | 0.09 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:65:THR:HA | 13 | 0.09 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:65:THR:HA | 21 | 0.09 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:65:THR:HA | 21 | 0.09 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:65:THR:HA | 21 | 0.09 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:26:ASN:H | 3 | 0.09 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:26:ASN:H | 3 | 0.09 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:26:ASN:H | 3 | 0.09 |
| (1,1552) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:24:GLY:H | 16 | 0.09 |
| (1,1552) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:24:GLY:H | 16 | 0.09 |
| (1,1552) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:24:GLY:H | 16 | 0.09 |
| (1,1552) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:24:GLY:H | 24 | 0.09 |
| (1,1552) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:24:GLY:H | 24 | 0.09 |
| (1,1552) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:24:GLY:H | 24 | 0.09 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:40:MET:HA | 8 | 0.09 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:40:MET:HA | 8 | 0.09 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:40:MET:HA | 8 | 0.09 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:40:MET:HA | 27 | 0.09 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:40:MET:HA | 27 | 0.09 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:40:MET:HA | 27 | 0.09 |
| (1,1523) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:70:GLN:H | 28 | 0.09 |
| (1,1494) | 1:A:46:GLN:HG2 | 1:A:50:ARG:HD2 | 9 | 0.09 |
| (1,1494) | 1:A:46:GLN:HG2 | 1:A:50:ARG:HD3 | 9 | 0.09 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:46:GLN:HG2 | 10 | 0.09 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:46:GLN:HG2 | 10 | 0.09 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|-------|---------------|
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:46:GLN:HG2 | 10 | 0.09 |
| | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:46:GLN:HG2 | 28 | 0.09 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:46:GLN:HG2 | 28 | 0.09 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:46:GLN:HG2 | 28 | 0.09 |
| (1,1489) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:ARG:HB2 | 28 | 0.09 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:19:ILE:HB | 11 | 0.09 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:19:ILE:HB | 11 | 0.09 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:19:ILE:HB | 11 | 0.09 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:19:ILE:HB | 29 | 0.09 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:19:ILE:HB | 29 | 0.09 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:19:ILE:HB | 29 | 0.09 |
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:69:LEU:H | 12 | 0.09 |
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:69:LEU:H | 12 | 0.09 |
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:69:LEU:H | 23 | 0.09 |
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:69:LEU:H | 23 | 0.09 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:57:PRO:HB3 | 20 | 0.09 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:57:PRO:HB3 | 20 | 0.09 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:57:PRO:HB3 | 20 | 0.09 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:51:GLU:HB2 | 11 | 0.09 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:51:GLU:HB2 | 11 | 0.09 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:51:GLU:HB2 | 11 | 0.09 |
| (1,111) | 1:A:55:VAL:HG21 | 1:A:49:GLU:HG3 | 1 | 0.09 |
| (1,111) | 1:A:55:VAL:HG22 | 1:A:49:GLU:HG3 | 1 | 0.09 |
| (1,111) | 1:A:55:VAL:HG23 | 1:A:49:GLU:HG3 | 1 | 0.09 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:H | 13 | 0.09 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:H | 13 | 0.09 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:H | 13 | 0.09 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:31:LEU:HA | 9 | 0.09 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:31:LEU:HA | 9 | 0.09 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:31:LEU:HA | 9 | 0.09 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:31:LEU:HA | 12 | 0.09 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:31:LEU:HA | 12 | 0.09 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:31:LEU:HA | 12 | 0.09 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:31:LEU:HA | 23 | 0.09 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:31:LEU:HA | 23 | 0.09 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:31:LEU:HA | 23 | 0.09 |
| (1,874) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:70:GLN:HG3 | 3 | 0.08 |
| (1,874) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:70:GLN:HG3 | 3 | 0.08 |
| (1,874) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:70:GLN:HG3 | 3 | 0.08 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:23:ALA:HA | 15 | 0.08 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:25:ILE:HA | 15 | 0.08 |
| (1,847) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HD2 | 27 | 0.08 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,847) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HD3 | 27 | 0.08 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:69:LEU:H | 13 | 0.08 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:69:LEU:H | 13 | 0.08 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:69:LEU:H | 13 | 0.08 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:69:LEU:H | 15 | 0.08 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:69:LEU:H | 15 | 0.08 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:69:LEU:H | 15 | 0.08 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:69:LEU:H | 23 | 0.08 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:69:LEU:H | 23 | 0.08 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:69:LEU:H | 23 | 0.08 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD11 | 2 | 0.08 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD12 | 2 | 0.08 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD13 | 2 | 0.08 |
| (1,787) | 1:A:51:GLU:HB3 | 1:A:6:GLN:HE21 | 25 | 0.08 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD11 | 18 | 0.08 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD12 | 18 | 0.08 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD13 | 18 | 0.08 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 18 | 0.08 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 18 | 0.08 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 18 | 0.08 |
| (1,704) | 1:A:59:ARG:HB2 | 1:A:59:ARG:H | 1 | 0.08 |
| (1,704) | 1:A:59:ARG:HB2 | 1:A:59:ARG:H | 3 | 0.08 |
| (1,704) | 1:A:59:ARG:HB2 | 1:A:59:ARG:H | 13 | 0.08 |
| (1,704) | 1:A:59:ARG:HB2 | 1:A:59:ARG:H | 28 | 0.08 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB1 | 5 | 0.08 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB2 | 5 | 0.08 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB3 | 5 | 0.08 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB1 | 5 | 0.08 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB2 | 5 | 0.08 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB3 | 5 | 0.08 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB1 | 5 | 0.08 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB2 | 5 | 0.08 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB3 | 5 | 0.08 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB1 | 11 | 0.08 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB2 | 11 | 0.08 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB3 | 11 | 0.08 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB1 | 11 | 0.08 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB2 | 11 | 0.08 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB3 | 11 | 0.08 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB1 | 11 | 0.08 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB2 | 11 | 0.08 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB3 | 11 | 0.08 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD11 | 1:A:43:GLU:HG2 | 30 | 0.08 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD12 | 1:A:43:GLU:HG2 | 30 | 0.08 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD13 | 1:A:43:GLU:HG2 | 30 | 0.08 |
| (1,491) | 1:A:27:LEU:HA | 1:A:66:LEU:H | 30 | 0.08 |
| (1,479) | 1:A:23:ALA:HA | 1:A:21:ASP:HA | 7 | 0.08 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:20:ARG:HB2 | 24 | 0.08 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:20:ARG:HB2 | 24 | 0.08 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:20:ARG:HB2 | 24 | 0.08 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:32:ALA:HA | 23 | 0.08 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:32:ALA:HA | 23 | 0.08 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:32:ALA:HA | 23 | 0.08 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:50:ARG:HA | 23 | 0.08 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:50:ARG:HA | 23 | 0.08 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:50:ARG:HA | 23 | 0.08 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 11 | 0.08 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 11 | 0.08 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 11 | 0.08 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 23 | 0.08 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 23 | 0.08 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 23 | 0.08 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 15 | 0.08 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 15 | 0.08 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 15 | 0.08 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 16 | 0.08 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 16 | 0.08 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 16 | 0.08 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 23 | 0.08 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 23 | 0.08 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 23 | 0.08 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 21 | 0.08 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 21 | 0.08 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 21 | 0.08 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:62:ARG:HG3 | 14 | 0.08 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:62:ARG:HG3 | 14 | 0.08 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:62:ARG:HG3 | 14 | 0.08 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:62:ARG:HG3 | 27 | 0.08 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:62:ARG:HG3 | 27 | 0.08 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:62:ARG:HG3 | 27 | 0.08 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:62:ARG:HG3 | 28 | 0.08 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:62:ARG:HG3 | 28 | 0.08 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:62:ARG:HG3 | 28 | 0.08 |
| (1,221) | 1:A:31:LEU:HB2 | 1:A:36:LEU:HB2 | 24 | 0.08 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,213) | 1:A:30:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HA | 5 | 0.08 |
| (1,213) | 1:A:30:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HA | 6 | 0.08 |
| (1,213) | 1:A:30:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HA | 7 | 0.08 |
| (1,213) | 1:A:30:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HA | 13 | 0.08 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:74:SER:H | 20 | 0.08 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:69:LEU:H | 20 | 0.08 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 12 | 0.08 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 12 | 0.08 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 12 | 0.08 |
| (1,1710) | 1:A:63:GLN:H | 1:A:64:LEU:H | 29 | 0.08 |
| (1,171) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:21:ASP:HA | 9 | 0.08 |
| (1,1597) | 1:A:27:LEU:HB2 | 1:A:27:LEU:H | 15 | 0.08 |
| (1,1584) | 1:A:59:ARG:HG3 | 1:A:58:ILE:H | 14 | 0.08 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:40:MET:HA | 24 | 0.08 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:40:MET:HA | 24 | 0.08 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:40:MET:HA | 24 | 0.08 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:45:ARG:HE | 16 | 0.08 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG22 | 1:A:45:ARG:HE | 16 | 0.08 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG23 | 1:A:45:ARG:HE | 16 | 0.08 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:45:ARG:HE | 22 | 0.08 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG22 | 1:A:45:ARG:HE | 22 | 0.08 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG23 | 1:A:45:ARG:HE | 22 | 0.08 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:45:ARG:HE | 30 | 0.08 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG22 | 1:A:45:ARG:HE | 30 | 0.08 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG23 | 1:A:45:ARG:HE | 30 | 0.08 |
| (1,1523) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:70:GLN:H | 7 | 0.08 |
| (1,1523) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:70:GLN:H | 12 | 0.08 |
| (1,1498) | 1:A:67:ARG:HD2 | 1:A:69:LEU:H | 4 | 0.08 |
| (1,1498) | 1:A:67:ARG:HD2 | 1:A:69:LEU:H | 6 | 0.08 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:19:ILE:HB | 13 | 0.08 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:19:ILE:HB | 13 | 0.08 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:19:ILE:HB | 13 | 0.08 |
| (1,1407) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:44:VAL:H | 13 | 0.08 |
| (1,1402) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:ARG:HB3 | 17 | 0.08 |
| (1,1402) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:ARG:HB3 | 18 | 0.08 |
| (1,1263) | 1:A:61:VAL:HG11 | 1:A:62:ARG:HB3 | 3 | 0.08 |
| (1,1263) | 1:A:61:VAL:HG12 | 1:A:62:ARG:HB3 | 3 | 0.08 |
| (1,1263) | 1:A:61:VAL:HG13 | 1:A:62:ARG:HB3 | 3 | 0.08 |
| (1,1222) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:63:GLN:HE22 | 16 | 0.08 |
| (1,1222) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:63:GLN:HE22 | 16 | 0.08 |
| (1,1222) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:63:GLN:HE22 | 16 | 0.08 |
| (1,1182) | 1:A:56:LEU:HB3 | 1:A:57:PRO:HG2 | 14 | 0.08 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1182) | 1:A:56:LEU:HB3 | 1:A:57:PRO:HB2 | 14 | 0.08 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:51:GLU:HB2 | 13 | 0.08 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:51:GLU:HB2 | 13 | 0.08 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:51:GLU:HB2 | 13 | 0.08 |
| (1,1148) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:48:LEU:HG | 2 | 0.08 |
| (1,1147) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:48:LEU:HB3 | 20 | 0.08 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD21 | 1:A:42:VAL:H | 17 | 0.08 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD22 | 1:A:42:VAL:H | 17 | 0.08 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD23 | 1:A:42:VAL:H | 17 | 0.08 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG21 | 24 | 0.08 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG22 | 24 | 0.08 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG23 | 24 | 0.08 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG21 | 24 | 0.08 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG22 | 24 | 0.08 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG23 | 24 | 0.08 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG21 | 24 | 0.08 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG22 | 24 | 0.08 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG23 | 24 | 0.08 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:H | 29 | 0.08 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:H | 29 | 0.08 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:H | 29 | 0.08 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:31:LEU:HA | 1 | 0.08 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:31:LEU:HA | 1 | 0.08 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:31:LEU:HA | 1 | 0.08 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:31:LEU:HA | 5 | 0.08 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:31:LEU:HA | 5 | 0.08 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:31:LEU:HA | 5 | 0.08 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:31:LEU:HA | 6 | 0.08 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:31:LEU:HA | 6 | 0.08 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:31:LEU:HA | 6 | 0.08 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:31:LEU:HA | 8 | 0.08 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:31:LEU:HA | 8 | 0.08 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:31:LEU:HA | 8 | 0.08 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:31:LEU:HA | 13 | 0.08 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:31:LEU:HA | 13 | 0.08 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:31:LEU:HA | 13 | 0.08 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:31:LEU:HA | 25 | 0.08 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:31:LEU:HA | 25 | 0.08 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:31:LEU:HA | 25 | 0.08 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:23:ALA:HA | 2 | 0.07 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:25:ILE:HA | 2 | 0.07 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:23:ALA:HA | 21 | 0.07 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:25:ILE:HA | 21 | 0.07 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:23:ALA:HA | 22 | 0.07 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:25:ILE:HA | 22 | 0.07 |
| (1,844) | 1:A:8:ASP:HB3 | 1:A:11:LYS:HB2 | 4 | 0.07 |
| (1,844) | 1:A:8:ASP:HB3 | 1:A:11:LYS:HB3 | 4 | 0.07 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:69:LEU:H | 11 | 0.07 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:69:LEU:H | 11 | 0.07 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:69:LEU:H | 11 | 0.07 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD11 | 29 | 0.07 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD12 | 29 | 0.07 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD13 | 29 | 0.07 |
| (1,769) | 1:A:82:LEU:HA | 1:A:82:LEU:HD11 | 12 | 0.07 |
| (1,769) | 1:A:82:LEU:HA | 1:A:82:LEU:HD12 | 12 | 0.07 |
| (1,769) | 1:A:82:LEU:HA | 1:A:82:LEU:HD13 | 12 | 0.07 |
| (1,740) | 1:A:70:GLN:HA | 1:A:10:VAL:HG21 | 2 | 0.07 |
| (1,740) | 1:A:70:GLN:HA | 1:A:10:VAL:HG22 | 2 | 0.07 |
| (1,740) | 1:A:70:GLN:HA | 1:A:10:VAL:HG23 | 2 | 0.07 |
| (1,732) | 1:A:63:GLN:HG3 | 1:A:60:GLU:HA | 3 | 0.07 |
| (1,732) | 1:A:63:GLN:HG3 | 1:A:60:GLU:HA | 22 | 0.07 |
| (1,662) | 1:A:49:GLU:HA | 1:A:46:GLN:HA | 6 | 0.07 |
| (1,662) | 1:A:49:GLU:HA | 1:A:46:GLN:HA | 17 | 0.07 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB1 | 6 | 0.07 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB2 | 6 | 0.07 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB3 | 6 | 0.07 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB1 | 6 | 0.07 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB2 | 6 | 0.07 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB3 | 6 | 0.07 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB1 | 6 | 0.07 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB2 | 6 | 0.07 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB3 | 6 | 0.07 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB1 | 17 | 0.07 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB2 | 17 | 0.07 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB3 | 17 | 0.07 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB1 | 17 | 0.07 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB2 | 17 | 0.07 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB3 | 17 | 0.07 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB1 | 17 | 0.07 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB2 | 17 | 0.07 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB3 | 17 | 0.07 |
| (1,479) | 1:A:23:ALA:HA | 1:A:21:ASP:HA | 18 | 0.07 |
| (1,479) | 1:A:23:ALA:HA | 1:A:21:ASP:HA | 29 | 0.07 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:20:ARG:HB2 | 30 | 0.07 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:20:ARG:HB2 | 30 | 0.07 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:20:ARG:HB2 | 30 | 0.07 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:21:ASP:HA | 7 | 0.07 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:21:ASP:HA | 7 | 0.07 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:21:ASP:HA | 7 | 0.07 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:21:ASP:HA | 14 | 0.07 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:21:ASP:HA | 14 | 0.07 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:21:ASP:HA | 14 | 0.07 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:21:ASP:HA | 30 | 0.07 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:21:ASP:HA | 30 | 0.07 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:21:ASP:HA | 30 | 0.07 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:32:ALA:HA | 30 | 0.07 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:32:ALA:HA | 30 | 0.07 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:32:ALA:HA | 30 | 0.07 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:50:ARG:HA | 30 | 0.07 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:50:ARG:HA | 30 | 0.07 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:50:ARG:HA | 30 | 0.07 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG21 | 2 | 0.07 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG22 | 2 | 0.07 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG23 | 2 | 0.07 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HB2 | 18 | 0.07 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HB2 | 18 | 0.07 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HB2 | 18 | 0.07 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD21 | 1:A:36:LEU:HB2 | 18 | 0.07 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD22 | 1:A:36:LEU:HB2 | 18 | 0.07 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD23 | 1:A:36:LEU:HB2 | 18 | 0.07 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 1 | 0.07 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 1 | 0.07 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 1 | 0.07 |
| (1,25) | 1:A:52:HIS:HB2 | 1:A:48:LEU:HA | 2 | 0.07 |
| (1,25) | 1:A:52:HIS:HB2 | 1:A:74:SER:HB3 | 2 | 0.07 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 12 | 0.07 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 12 | 0.07 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 12 | 0.07 |
| (1,221) | 1:A:31:LEU:HB2 | 1:A:36:LEU:HB2 | 18 | 0.07 |
| (1,213) | 1:A:30:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HA | 29 | 0.07 |
| (1,213) | 1:A:30:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HA | 30 | 0.07 |
| (1,192) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD21 | 14 | 0.07 |
| (1,192) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD22 | 14 | 0.07 |
| (1,192) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD23 | 14 | 0.07 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:74:SER:H | 11 | 0.07 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:69:LEU:H | 11 | 0.07 |



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

| (1,1732) | | $\mathbf{Atom-2}$ | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-------------------|-------|---------------|
| | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG21 | 9 | 0.07 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG22 | 9 | 0.07 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG23 | 9 | 0.07 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG21 | 12 | 0.07 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG22 | 12 | 0.07 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG23 | 12 | 0.07 |
| (1,1726) | 1:A:80:THR:H | 1:A:81:GLU:H | 14 | 0.07 |
| (1,1710) | 1:A:63:GLN:H | 1:A:64:LEU:H | 26 | 0.07 |
| (1,1710) | 1:A:63:GLN:H | 1:A:64:LEU:H | 30 | 0.07 |
| (1,171) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:21:ASP:HA | 4 | 0.07 |
| (1,171) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:21:ASP:HA | 15 | 0.07 |
| (1,171) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:21:ASP:HA | 29 | 0.07 |
| (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 30 | 0.07 |
| (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 30 | 0.07 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 30 | 0.07 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB3 | 1:A:64:LEU:H | 30 | 0.07 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:29:SER:HA | 5 | 0.07 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:29:SER:HA | 5 | 0.07 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:29:SER:HA | 5 | 0.07 |
| (1,1589) | 1:A:20:ARG:HG3 | 1:A:67:ARG:HE | 23 | 0.07 |
| (1,1587) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:75:LYS:HE2 | 8 | 0.07 |
| (1,1587) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:75:LYS:HE3 | 8 | 0.07 |
| (1,1587) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:75:LYS:HE2 | 10 | 0.07 |
| (1,1587) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:75:LYS:HE3 | 10 | 0.07 |
| (1,1587) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:75:LYS:HE2 | 24 | 0.07 |
| (1,1587) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:75:LYS:HE3 | 24 | 0.07 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG2 | 1:A:75:LYS:HE2 | 10 | 0.07 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG2 | 1:A:75:LYS:HE3 | 10 | 0.07 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG3 | 1:A:75:LYS:HE2 | 10 | 0.07 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG3 | 1:A:75:LYS:HE3 | 10 | 0.07 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG2 | 1:A:75:LYS:HE2 | 14 | 0.07 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG2 | 1:A:75:LYS:HE3 | 14 | 0.07 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG3 | 1:A:75:LYS:HE2 | 14 | 0.07 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG3 | 1:A:75:LYS:HE3 | 14 | 0.07 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG2 | 1:A:75:LYS:HE2 | 24 | 0.07 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG2 | 1:A:75:LYS:HE3 | 24 | 0.07 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG3 | 1:A:75:LYS:HE2 | 24 | 0.07 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG3 | 1:A:75:LYS:HE3 | 24 | 0.07 |
| (1,1584) | 1:A:59:ARG:HG3 | 1:A:58:ILE:H | 30 | 0.07 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:65:THR:HA | 15 | 0.07 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:65:THR:HA | 15 | 0.07 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:65:THR:HA | 15 | 0.07 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|-------|---------------|
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:13:VAL:H | 2 | 0.07 |
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:13:VAL:H | 2 | 0.07 |
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:13:VAL:H | 2 | 0.07 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:26:ASN:H | 14 | 0.07 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:26:ASN:H | 14 | 0.07 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:26:ASN:H | 14 | 0.07 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:26:ASN:H | 29 | 0.07 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:26:ASN:H | 29 | 0.07 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:26:ASN:H | 29 | 0.07 |
| (1,1552) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:24:GLY:H | 7 | 0.07 |
| (1,1552) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:24:GLY:H | 7 | 0.07 |
| (1,1552) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:24:GLY:H | 7 | 0.07 |
| (1,1552) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:24:GLY:H | 13 | 0.07 |
| (1,1552) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:24:GLY:H | 13 | 0.07 |
| (1,1552) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:24:GLY:H | 13 | 0.07 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:40:MET:HA | 9 | 0.07 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:40:MET:HA | 9 | 0.07 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:40:MET:HA | 9 | 0.07 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:40:MET:HA | 13 | 0.07 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:40:MET:HA | 13 | 0.07 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:40:MET:HA | 13 | 0.07 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:42:VAL:HA | 28 | 0.07 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:42:VAL:HA | 28 | 0.07 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:42:VAL:HA | 28 | 0.07 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:45:ARG:HE | 10 | 0.07 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG22 | 1:A:45:ARG:HE | 10 | 0.07 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG23 | 1:A:45:ARG:HE | 10 | 0.07 |
| (1,1523) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:70:GLN:H | 4 | 0.07 |
| (1,1523) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:70:GLN:H | 9 | 0.07 |
| (1,1523) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:70:GLN:H | 15 | 0.07 |
| (1,1521) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:9:LEU:HD11 | 28 | 0.07 |
| (1,1521) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:9:LEU:HD12 | 28 | 0.07 |
| (1,1521) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:9:LEU:HD13 | 28 | 0.07 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD2 | 8 | 0.07 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD3 | 8 | 0.07 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 8 | 0.07 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 8 | 0.07 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD2 | 8 | 0.07 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD3 | 8 | 0.07 |
| (1,1498) | 1:A:67:ARG:HD2 | 1:A:69:LEU:H | 23 | 0.07 |
| (1,1498) | 1:A:67:ARG:HD2 | 1:A:69:LEU:H | 27 | 0.07 |
| (1,1489) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:ARG:HB2 | 19 | 0.07 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|-------|---------------|
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:19:ILE:HB | 2 | 0.07 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:19:ILE:HB | 2 | 0.07 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:19:ILE:HB | 2 | 0.07 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:19:ILE:HB | 14 | 0.07 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:19:ILE:HB | 14 | 0.07 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:19:ILE:HB | 14 | 0.07 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:19:ILE:HB | 19 | 0.07 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:19:ILE:HB | 19 | 0.07 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:19:ILE:HB | 19 | 0.07 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:19:ILE:HB | 24 | 0.07 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:19:ILE:HB | 24 | 0.07 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:19:ILE:HB | 24 | 0.07 |
| (1,1429) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:39:LEU:H | 16 | 0.07 |
| (1,1429) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:39:LEU:H | 16 | 0.07 |
| (1,1429) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:39:LEU:H | 16 | 0.07 |
| (1,1407) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:44:VAL:H | 11 | 0.07 |
| (1,1407) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:44:VAL:H | 21 | 0.07 |
| (1,1402) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:ARG:HB3 | 10 | 0.07 |
| (1,1393) | 1:A:44:VAL:HA | 1:A:48:LEU:HG | 19 | 0.07 |
| (1,1376) | 1:A:12:ALA:HB1 | 1:A:7:ARG:HD2 | 20 | 0.07 |
| (1,1376) | 1:A:12:ALA:HB1 | 1:A:7:ARG:HD3 | 20 | 0.07 |
| (1,1376) | 1:A:12:ALA:HB2 | 1:A:7:ARG:HD2 | 20 | 0.07 |
| (1,1376) | 1:A:12:ALA:HB2 | 1:A:7:ARG:HD3 | 20 | 0.07 |
| (1,1376) | 1:A:12:ALA:HB3 | 1:A:7:ARG:HD2 | 20 | 0.07 |
| (1,1376) | 1:A:12:ALA:HB3 | 1:A:7:ARG:HD3 | 20 | 0.07 |
| (1,1369) | 1:A:71:GLU:HG2 | 1:A:72:MET:H | 26 | 0.07 |
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:69:LEU:H | 17 | 0.07 |
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:69:LEU:H | 17 | 0.07 |
| (1,1248) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:62:ARG:HB3 | 12 | 0.07 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:57:PRO:HB3 | 24 | 0.07 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:57:PRO:HB3 | 24 | 0.07 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:57:PRO:HB3 | 24 | 0.07 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HB2 | 13 | 0.07 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HG2 | 13 | 0.07 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HB2 | 18 | 0.07 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HG2 | 18 | 0.07 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HB2 | 21 | 0.07 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HG2 | 21 | 0.07 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD21 | 1:A:42:VAL:H | 15 | 0.07 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD22 | 1:A:42:VAL:H | 15 | 0.07 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD23 | 1:A:42:VAL:H | 15 | 0.07 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD21 | 1:A:42:VAL:H | 20 | 0.07 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD22 | 1:A:42:VAL:H | 20 | 0.07 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD23 | 1:A:42:VAL:H | 20 | 0.07 |
| (1,1086) | 1:A:39:LEU:HB2 | 1:A:41:GLY:H | 7 | 0.07 |
| (1,1049) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:40:MET:HB3 | 14 | 0.07 |
| (1,1049) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:40:MET:HB3 | 14 | 0.07 |
| (1,1049) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:40:MET:HB3 | 14 | 0.07 |
| (1,1037) | 1:A:36:LEU:HB3 | 1:A:40:MET:HA | 8 | 0.07 |
| (1,1037) | 1:A:36:LEU:HB3 | 1:A:40:MET:HA | 19 | 0.07 |
| (1,933) | 1:A:57:PRO:HG3 | 1:A:60:GLU:H | 20 | 0.06 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:43:GLU:H | 29 | 0.06 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG22 | 1:A:43:GLU:H | 29 | 0.06 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG23 | 1:A:43:GLU:H | 29 | 0.06 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:42:VAL:H | 29 | 0.06 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG22 | 1:A:42:VAL:H | 29 | 0.06 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG23 | 1:A:42:VAL:H | 29 | 0.06 |
| (1,9) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:50:ARG:HE | 29 | 0.06 |
| (1,9) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:50:ARG:HE | 29 | 0.06 |
| (1,9) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:50:ARG:HE | 29 | 0.06 |
| (1,874) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:70:GLN:HG3 | 7 | 0.06 |
| (1,874) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:70:GLN:HG3 | 7 | 0.06 |
| (1,874) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:70:GLN:HG3 | 7 | 0.06 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:23:ALA:HA | 27 | 0.06 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:25:ILE:HA | 27 | 0.06 |
| (1,846) | 1:A:8:ASP:HB3 | 1:A:11:LYS:HD2 | 11 | 0.06 |
| (1,846) | 1:A:8:ASP:HB3 | 1:A:11:LYS:HD3 | 11 | 0.06 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD11 | 14 | 0.06 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD12 | 14 | 0.06 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD13 | 14 | 0.06 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD21 | 14 | 0.06 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD22 | 14 | 0.06 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD23 | 14 | 0.06 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.06 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.06 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.06 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:9:LEU:HB3 | 11 | 0.06 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG2 | 11 | 0.06 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG3 | 11 | 0.06 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:69:LEU:H | 9 | 0.06 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:69:LEU:H | 9 | 0.06 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:69:LEU:H | 9 | 0.06 |
| (1,806) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:67:ARG:HB2 | 22 | 0.06 |
| (1,806) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:67:ARG:HB3 | 22 | 0.06 |



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

| (1,806) 1:A:65:THR:HG22 1:A:67:ARG:HB2 22 (1,806) 1:A:65:THR:HG22 1:A:67:ARG:HB3 22 (1,806) 1:A:65:THR:HG23 1:A:67:ARG:HB2 22 (1,806) 1:A:65:THR:HG23 1:A:67:ARG:HB3 22 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 1 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 1 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 1 (1,769) 1:A:82:LEU:HA 1:A:82:LEU:HD11 26 (1,769) 1:A:82:LEU:HA 1:A:82:LEU:HD12 26 (1,769) 1:A:82:LEU:HA 1:A:82:LEU:HD13 26 (1,769) 1:A:82:LEU:HA 1:A:82:LEU:HD13 26 (1,769) 1:A:82:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 24 | $\operatorname{lation}(ext{\AA})$ |
|---|------------------------------------|
| (1,806) 1:A:65:THR:HG23 1:A:67:ARG:HB2 22 (1,806) 1:A:65:THR:HG23 1:A:67:ARG:HB3 22 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 1 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 1 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 1 (1,769) 1:A:82:LEU:HA 1:A:82:LEU:HD11 26 (1,769) 1:A:82:LEU:HA 1:A:82:LEU:HD12 26 (1,769) 1:A:82:LEU:HA 1:A:82:LEU:HD13 26 (1,72) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 24 | 0.06 |
| (1,806) 1:A:65:THR:HG23 1:A:67:ARG:HB3 22 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 1 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 1 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 1 (1,769) 1:A:82:LEU:HA 1:A:82:LEU:HD11 26 (1,769) 1:A:82:LEU:HA 1:A:82:LEU:HD12 26 (1,769) 1:A:82:LEU:HA 1:A:82:LEU:HD13 26 (1,72) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 24 | 0.06 |
| (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 1 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 1 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 1 (1,769) 1:A:82:LEU:HA 1:A:82:LEU:HD11 26 (1,769) 1:A:82:LEU:HA 1:A:82:LEU:HD12 26 (1,769) 1:A:82:LEU:HA 1:A:82:LEU:HD13 26 (1,72) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 24 | 0.06 |
| (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 1 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 1 (1,769) 1:A:82:LEU:HA 1:A:82:LEU:HD11 26 (1,769) 1:A:82:LEU:HA 1:A:82:LEU:HD12 26 (1,769) 1:A:82:LEU:HA 1:A:82:LEU:HD13 26 (1,72) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 24 | 0.06 |
| (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 1 (1,769) 1:A:82:LEU:HA 1:A:82:LEU:HD11 26 (1,769) 1:A:82:LEU:HA 1:A:82:LEU:HD12 26 (1,769) 1:A:82:LEU:HA 1:A:82:LEU:HD13 26 (1,72) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 24 | 0.06 |
| (1,769) 1:A:82:LEU:HA 1:A:82:LEU:HD11 26 (1,769) 1:A:82:LEU:HA 1:A:82:LEU:HD12 26 (1,769) 1:A:82:LEU:HA 1:A:82:LEU:HD13 26 (1,72) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 24 | 0.06 |
| (1,769) 1:A:82:LEU:HA 1:A:82:LEU:HD12 26 (1,769) 1:A:82:LEU:HA 1:A:82:LEU:HD13 26 (1,72) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 24 | 0.06 |
| (1,769) 1:A:82:LEU:HA 1:A:82:LEU:HD13 26 (1,72) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 24 | 0.06 |
| (1,72) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 24 | 0.06 |
| | 0.06 |
| | 0.06 |
| (1,72) 1:A:48:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 24 | 0.06 |
| (1,72) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 24 | 0.06 |
| (1,72) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:6:GLN:HE21 24 | 0.06 |
| (1,72) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:6:GLN:HE21 24 | 0.06 |
| (1,72) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:6:GLN:HE21 24 | 0.06 |
| (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 5 | 0.06 |
| (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 5 | 0.06 |
| (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 14 | 0.06 |
| (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 14 | 0.06 |
| (1,673) 1:A:43:GLU:HA 1:A:39:LEU:HD21 3 | 0.06 |
| (1,673) 1:A:43:GLU:HA 1:A:39:LEU:HD22 3 | 0.06 |
| (1,673) 1:A:43:GLU:HA 1:A:39:LEU:HD23 3 | 0.06 |
| (1,673) 1:A:43:GLU:HA 1:A:39:LEU:HD21 18 | 0.06 |
| (1,673) 1:A:43:GLU:HA 1:A:39:LEU:HD22 18 | 0.06 |
| (1,673) 1:A:43:GLU:HA 1:A:39:LEU:HD23 18 | 0.06 |
| (1,662) 1:A:49:GLU:HA 1:A:46:GLN:HA 26 | 0.06 |
| (1,593) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:66:LEU:HA 12 | 0.06 |
| (1,593) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:66:LEU:HA 12 | 0.06 |
| (1,593) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:66:LEU:HA 12 | 0.06 |
| (1,536) 1:A:25:ILE:HD11 1:A:14:ALA:HB1 3 | 0.06 |
| (1,536) 1:A:25:ILE:HD11 1:A:14:ALA:HB2 3 | 0.06 |
| (1,536) 1:A:25:ILE:HD11 1:A:14:ALA:HB3 3 | 0.06 |
| (1,536) 1:A:25:ILE:HD12 1:A:14:ALA:HB1 3 | 0.06 |
| (1,536) 1:A:25:ILE:HD12 1:A:14:ALA:HB2 3 | 0.06 |
| (1,536) 1:A:25:ILE:HD12 1:A:14:ALA:HB3 3 | 0.06 |
| (1,536) 1:A:25:ILE:HD13 1:A:14:ALA:HB1 3 | 0.06 |
| (1,536) 1:A:25:ILE:HD13 1:A:14:ALA:HB2 3 | 0.06 |
| (1,536) 1:A:25:ILE:HD13 1:A:14:ALA:HB3 3 | 0.06 |
| (1,491) 1:A:27:LEU:HA 1:A:66:LEU:H 7 | 0.06 |
| (1,491) 1:A:27:LEU:HA 1:A:66:LEU:H 28 | 0.06 |
| (1,479) 1:A:23:ALA:HA 1:A:21:ASP:HA 3 | 0.06 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,479) | 1:A:23:ALA:HA | 1:A:21:ASP:HA | 6 | 0.06 |
| (1,479) | 1:A:23:ALA:HA | 1:A:21:ASP:HA | 17 | 0.06 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:20:ARG:HB2 | 27 | 0.06 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:20:ARG:HB2 | 27 | 0.06 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:20:ARG:HB2 | 27 | 0.06 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:17:LEU:H | 15 | 0.06 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:17:LEU:H | 15 | 0.06 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:17:LEU:H | 15 | 0.06 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:73:SER:H | 15 | 0.06 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:73:SER:H | 15 | 0.06 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:73:SER:H | 15 | 0.06 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:18:GLY:H | 15 | 0.06 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:18:GLY:H | 15 | 0.06 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:18:GLY:H | 15 | 0.06 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:21:ASP:HA | 8 | 0.06 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:21:ASP:HA | 8 | 0.06 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:21:ASP:HA | 8 | 0.06 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:21:ASP:HA | 19 | 0.06 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:21:ASP:HA | 19 | 0.06 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:21:ASP:HA | 19 | 0.06 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:21:ASP:HA | 22 | 0.06 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:21:ASP:HA | 22 | 0.06 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:21:ASP:HA | 22 | 0.06 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:32:ALA:HA | 15 | 0.06 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:32:ALA:HA | 15 | 0.06 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:32:ALA:HA | 15 | 0.06 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:50:ARG:HA | 15 | 0.06 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:50:ARG:HA | 15 | 0.06 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:50:ARG:HA | 15 | 0.06 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 4 | 0.06 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 4 | 0.06 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 4 | 0.06 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 9 | 0.06 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 9 | 0.06 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 9 | 0.06 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 23 | 0.06 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 23 | 0.06 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 23 | 0.06 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 27 | 0.06 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 27 | 0.06 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 27 | 0.06 |
| (1,224) | 1:A:31:LEU:HB2 | 1:A:36:LEU:HD21 | 30 | 0.06 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,224) | 1:A:31:LEU:HB2 | 1:A:36:LEU:HD22 | 30 | 0.06 |
| (1,224) | 1:A:31:LEU:HB2 | 1:A:36:LEU:HD23 | 30 | 0.06 |
| (1,221) | 1:A:31:LEU:HB2 | 1:A:36:LEU:HB2 | 20 | 0.06 |
| (1,213) | 1:A:30:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HA | 18 | 0.06 |
| (1,213) | 1:A:30:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HA | 21 | 0.06 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:74:SER:H | 1 | 0.06 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:69:LEU:H | 1 | 0.06 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:74:SER:H | 4 | 0.06 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:69:LEU:H | 4 | 0.06 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:74:SER:H | 27 | 0.06 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:69:LEU:H | 27 | 0.06 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 19 | 0.06 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 19 | 0.06 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 19 | 0.06 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 25 | 0.06 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 25 | 0.06 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 25 | 0.06 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 28 | 0.06 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 28 | 0.06 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 28 | 0.06 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG21 | 10 | 0.06 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG22 | 10 | 0.06 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG23 | 10 | 0.06 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG21 | 27 | 0.06 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG22 | 27 | 0.06 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG23 | 27 | 0.06 |
| (1,1726) | 1:A:80:THR:H | 1:A:81:GLU:H | 15 | 0.06 |
| (1,1710) | 1:A:63:GLN:H | 1:A:64:LEU:H | 4 | 0.06 |
| (1,1710) | 1:A:63:GLN:H | 1:A:64:LEU:H | 11 | 0.06 |
| (1,171) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:21:ASP:HA | 13 | 0.06 |
| (1,171) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:21:ASP:HA | 14 | 0.06 |
| (1,171) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:21:ASP:HA | 16 | 0.06 |
| (1,171) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:21:ASP:HA | 20 | 0.06 |
| (1,171) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:21:ASP:HA | 21 | 0.06 |
| (1,1701) | 1:A:47:ILE:H | 1:A:48:LEU:H | 23 | 0.06 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:9:LEU:HD21 | 14 | 0.06 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:9:LEU:HD22 | 14 | 0.06 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:9:LEU:HD23 | 14 | 0.06 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:9:LEU:HD21 | 14 | 0.06 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:9:LEU:HD22 | 14 | 0.06 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:9:LEU:HD23 | 14 | 0.06 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 29 | 0.06 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|-------|---------------|
| | 1:A:68:LYS:HB3 | 1:A:64:LEU:H | 29 | 0.06 |
| (1,1584) | 1:A:59:ARG:HG3 | 1:A:58:ILE:H | 19 | 0.06 |
| (1,1555) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB3 | 24 | 0.06 |
| (1,1555) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB3 | 24 | 0.06 |
| (1,1555) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB3 | 24 | 0.06 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:26:ASN:H | 17 | 0.06 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:26:ASN:H | 17 | 0.06 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:26:ASN:H | 17 | 0.06 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:26:ASN:H | 19 | 0.06 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:26:ASN:H | 19 | 0.06 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:26:ASN:H | 19 | 0.06 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:42:VAL:HA | 9 | 0.06 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:42:VAL:HA | 9 | 0.06 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:42:VAL:HA | 9 | 0.06 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:42:VAL:HA | 19 | 0.06 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:42:VAL:HA | 19 | 0.06 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:42:VAL:HA | 19 | 0.06 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:45:ARG:HE | 19 | 0.06 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG22 | 1:A:45:ARG:HE | 19 | 0.06 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG23 | 1:A:45:ARG:HE | 19 | 0.06 |
| (1,1523) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:70:GLN:H | 17 | 0.06 |
| (1,1523) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:70:GLN:H | 21 | 0.06 |
| (1,1523) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:70:GLN:H | 30 | 0.06 |
| (1,1509) | 1:A:72:MET:HG2 | 1:A:9:LEU:HD11 | 23 | 0.06 |
| (1,1509) | 1:A:72:MET:HG2 | 1:A:9:LEU:HD12 | 23 | 0.06 |
| (1,1509) | 1:A:72:MET:HG2 | 1:A:9:LEU:HD13 | 23 | 0.06 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD2 | 4 | 0.06 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD3 | 4 | 0.06 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 4 | 0.06 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 4 | 0.06 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD2 | 4 | 0.06 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD3 | 4 | 0.06 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD2 | 11 | 0.06 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD3 | 11 | 0.06 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 11 | 0.06 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 11 | 0.06 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD2 | 11 | 0.06 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD3 | 11 | 0.06 |
| (1,1498) | 1:A:67:ARG:HD2 | 1:A:69:LEU:H | 1 | 0.06 |
| (1,1498) | 1:A:67:ARG:HD2 | 1:A:69:LEU:H | 2 | 0.06 |
| (1,1498) | 1:A:67:ARG:HD2 | 1:A:69:LEU:H | 12 | 0.06 |
| (1,1498) | 1:A:67:ARG:HD2 | 1:A:69:LEU:H | 16 | 0.06 |



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

| | Atom-1 | $\mathbf{Atom}	extbf{-2}$ | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|---------------------------|-------|---------------|
| (1,1498) | 1:A:67:ARG:HD2 | 1:A:69:LEU:H | 17 | 0.06 |
| (1,1498) | 1:A:67:ARG:HD2 | 1:A:69:LEU:H | 29 | 0.06 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:19:ILE:HB | 6 | 0.06 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:19:ILE:HB | 6 | 0.06 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:19:ILE:HB | 6 | 0.06 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:19:ILE:HB | 8 | 0.06 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:19:ILE:HB | 8 | 0.06 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:19:ILE:HB | 8 | 0.06 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:19:ILE:HB | 20 | 0.06 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:19:ILE:HB | 20 | 0.06 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:19:ILE:HB | 20 | 0.06 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG11 | 21 | 0.06 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG12 | 21 | 0.06 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG13 | 21 | 0.06 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG11 | 21 | 0.06 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG12 | 21 | 0.06 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG13 | 21 | 0.06 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG11 | 21 | 0.06 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG12 | 21 | 0.06 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG13 | 21 | 0.06 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG11 | 25 | 0.06 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG12 | 25 | 0.06 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG13 | 25 | 0.06 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG11 | 25 | 0.06 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG12 | 25 | 0.06 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG13 | 25 | 0.06 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG11 | 25 | 0.06 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG12 | 25 | 0.06 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG13 | 25 | 0.06 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:47:ILE:HG13 | 28 | 0.06 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:47:ILE:HG13 | 28 | 0.06 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:47:ILE:HG13 | 28 | 0.06 |
| (1,1435) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:9:LEU:HA | 3 | 0.06 |
| (1,1435) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:9:LEU:HA | 3 | 0.06 |
| (1,1435) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:9:LEU:HA | 3 | 0.06 |
| (1,1411) | 1:A:42:VAL:HG11 | 1:A:43:GLU:HG3 | 25 | 0.06 |
| (1,1411) | 1:A:42:VAL:HG12 | 1:A:43:GLU:HG3 | 25 | 0.06 |
| (1,1411) | 1:A:42:VAL:HG13 | 1:A:43:GLU:HG3 | 25 | 0.06 |
| (1,1407) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:44:VAL:H | 24 | 0.06 |
| (1,1393) | 1:A:44:VAL:HA | 1:A:48:LEU:HG | 9 | 0.06 |
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:69:LEU:H | 1 | 0.06 |
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:69:LEU:H | 1 | 0.06 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:69:LEU:H | 7 | 0.06 |
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:69:LEU:H | 7 | 0.06 |
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:69:LEU:H | 13 | 0.06 |
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:69:LEU:H | 13 | 0.06 |
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:69:LEU:H | 27 | 0.06 |
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:69:LEU:H | 27 | 0.06 |
| (1,1327) | 1:A:68:LYS:HD2 | 1:A:71:GLU:HB2 | 21 | 0.06 |
| (1,1327) | 1:A:68:LYS:HD3 | 1:A:71:GLU:HB2 | 21 | 0.06 |
| (1,1263) | 1:A:61:VAL:HG11 | 1:A:62:ARG:HB3 | 1 | 0.06 |
| (1,1263) | 1:A:61:VAL:HG12 | 1:A:62:ARG:HB3 | 1 | 0.06 |
| (1,1263) | 1:A:61:VAL:HG13 | 1:A:62:ARG:HB3 | 1 | 0.06 |
| (1,1220) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:ARG:HD2 | 19 | 0.06 |
| (1,1220) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:ARG:HD2 | 19 | 0.06 |
| (1,1220) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:ARG:HD2 | 19 | 0.06 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HB2 | 22 | 0.06 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HG2 | 22 | 0.06 |
| (1,1160) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HA | 26 | 0.06 |
| (1,1160) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HA | 26 | 0.06 |
| (1,1160) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HA | 26 | 0.06 |
| (1,1140) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:H | 24 | 0.06 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD21 | 1:A:42:VAL:H | 2 | 0.06 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD22 | 1:A:42:VAL:H | 2 | 0.06 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD23 | 1:A:42:VAL:H | 2 | 0.06 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD21 | 1:A:42:VAL:H | 14 | 0.06 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD22 | 1:A:42:VAL:H | 14 | 0.06 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD23 | 1:A:42:VAL:H | 14 | 0.06 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD21 | 1:A:42:VAL:H | 30 | 0.06 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD22 | 1:A:42:VAL:H | 30 | 0.06 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD23 | 1:A:42:VAL:H | 30 | 0.06 |
| (1,1091) | 1:A:39:LEU:HD11 | 1:A:39:LEU:HA | 24 | 0.06 |
| (1,1091) | 1:A:39:LEU:HD12 | 1:A:39:LEU:HA | 24 | 0.06 |
| (1,1091) | 1:A:39:LEU:HD13 | 1:A:39:LEU:HA | 24 | 0.06 |
| (1,1061) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:38:SER:H | 6 | 0.06 |
| (1,1061) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:38:SER:H | 6 | 0.06 |
| (1,1061) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:38:SER:H | 6 | 0.06 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG21 | 14 | 0.06 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG22 | 14 | 0.06 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG23 | 14 | 0.06 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG21 | 14 | 0.06 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG22 | 14 | 0.06 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG23 | 14 | 0.06 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG21 | 14 | 0.06 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG22 | 14 | 0.06 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG23 | 14 | 0.06 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:31:LEU:HA | 11 | 0.06 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:31:LEU:HA | 11 | 0.06 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:31:LEU:HA | 11 | 0.06 |
| (1,1016) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:29:SER:H | 16 | 0.06 |
| (1,1016) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:29:SER:H | 16 | 0.06 |
| (1,1016) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:29:SER:H | 16 | 0.06 |
| (1,1009) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:29:SER:HB2 | 9 | 0.06 |
| (1,1009) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:29:SER:HB2 | 9 | 0.06 |
| (1,1009) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:29:SER:HB2 | 9 | 0.06 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:31:LEU:HA | 11 | 0.06 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:31:LEU:HA | 11 | 0.06 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:31:LEU:HA | 11 | 0.06 |
| (1,989) | 1:A:31:LEU:HB3 | 1:A:36:LEU:HB3 | 28 | 0.05 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:70:GLN:HE21 | 1 | 0.05 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:70:GLN:HE21 | 1 | 0.05 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:70:GLN:HE21 | 1 | 0.05 |
| (1,971) | 1:A:27:LEU:HD11 | 1:A:25:ILE:H | 6 | 0.05 |
| (1,971) | 1:A:27:LEU:HD12 | 1:A:25:ILE:H | 6 | 0.05 |
| (1,971) | 1:A:27:LEU:HD13 | 1:A:25:ILE:H | 6 | 0.05 |
| (1,971) | 1:A:27:LEU:HD11 | 1:A:25:ILE:H | 18 | 0.05 |
| (1,971) | 1:A:27:LEU:HD12 | 1:A:25:ILE:H | 18 | 0.05 |
| (1,971) | 1:A:27:LEU:HD13 | 1:A:25:ILE:H | 18 | 0.05 |
| (1,943) | 1:A:57:PRO:HD2 | 1:A:56:LEU:HD21 | 20 | 0.05 |
| (1,943) | 1:A:57:PRO:HD2 | 1:A:56:LEU:HD22 | 20 | 0.05 |
| (1,943) | 1:A:57:PRO:HD2 | 1:A:56:LEU:HD23 | 20 | 0.05 |
| (1,896) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:6:GLN:HE21 | 27 | 0.05 |
| (1,896) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:6:GLN:HE21 | 27 | 0.05 |
| (1,896) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:6:GLN:HE21 | 27 | 0.05 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 2 | 0.05 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 2 | 0.05 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 2 | 0.05 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 27 | 0.05 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 27 | 0.05 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 27 | 0.05 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:23:ALA:HA | 3 | 0.05 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:25:ILE:HA | 3 | 0.05 |
| (1,847) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HD2 | 5 | 0.05 |
| (1,847) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HD3 | 5 | 0.05 |
| (1,846) | 1:A:8:ASP:HB3 | 1:A:11:LYS:HD2 | 28 | 0.05 |
| (1,846) | 1:A:8:ASP:HB3 | 1:A:11:LYS:HD3 | 28 | 0.05 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:9:LEU:HB3 | 6 | 0.05 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG2 | 6 | 0.05 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG3 | 6 | 0.05 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:9:LEU:HB3 | 12 | 0.05 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG2 | 12 | 0.05 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG3 | 12 | 0.05 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:69:LEU:H | 18 | 0.05 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:69:LEU:H | 18 | 0.05 |
| (1,813) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:69:LEU:H | 18 | 0.05 |
| (1,811) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:28:ASP:HA | 13 | 0.05 |
| (1,811) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:28:ASP:HA | 13 | 0.05 |
| (1,811) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:28:ASP:HA | 13 | 0.05 |
| (1,811) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:28:ASP:HA | 27 | 0.05 |
| (1,811) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:28:ASP:HA | 27 | 0.05 |
| (1,811) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:28:ASP:HA | 27 | 0.05 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD11 | 6 | 0.05 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD12 | 6 | 0.05 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD13 | 6 | 0.05 |
| (1,799) | 1:A:51:GLU:HG2 | 1:A:47:ILE:HG21 | 1 | 0.05 |
| (1,799) | 1:A:51:GLU:HG2 | 1:A:47:ILE:HG22 | 1 | 0.05 |
| (1,799) | 1:A:51:GLU:HG2 | 1:A:47:ILE:HG23 | 1 | 0.05 |
| (1,799) | 1:A:51:GLU:HG3 | 1:A:47:ILE:HG21 | 1 | 0.05 |
| (1,799) | 1:A:51:GLU:HG3 | 1:A:47:ILE:HG22 | 1 | 0.05 |
| (1,799) | 1:A:51:GLU:HG3 | 1:A:47:ILE:HG23 | 1 | 0.05 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD11 | 13 | 0.05 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD12 | 13 | 0.05 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD13 | 13 | 0.05 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 13 | 0.05 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 13 | 0.05 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 13 | 0.05 |
| (1,746) | 1:A:70:GLN:HG2 | 1:A:67:ARG:HA | 7 | 0.05 |
| (1,732) | 1:A:63:GLN:HG3 | 1:A:60:GLU:HA | 19 | 0.05 |
| (1,732) | 1:A:63:GLN:HG3 | 1:A:60:GLU:HA | 20 | 0.05 |
| (1,732) | 1:A:63:GLN:HG3 | 1:A:60:GLU:HA | 23 | 0.05 |
| (1,720) | 1:A:63:GLN:HB3 | 1:A:63:GLN:HE21 | 15 | 0.05 |
| (1,715) | 1:A:63:GLN:HB3 | 1:A:60:GLU:HA | 20 | 0.05 |
| (1,711) | 1:A:63:GLN:HA | 1:A:30:SER:HB2 | 27 | 0.05 |
| (1,706) | 1:A:59:ARG:HD2 | 1:A:59:ARG:H | 18 | 0.05 |
| (1,706) | 1:A:59:ARG:HD3 | 1:A:59:ARG:H | 18 | 0.05 |
| (1,684) | 1:A:43:GLU:HG3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 13 | 0.05 |
| (1,684) | 1:A:43:GLU:HG3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 13 | 0.05 |
| (1,684) | 1:A:43:GLU:HG3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 13 | 0.05 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD21 | 6 | 0.05 |
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD22 | 6 | 0.05 |
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD23 | 6 | 0.05 |
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD21 | 10 | 0.05 |
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD22 | 10 | 0.05 |
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD23 | 10 | 0.05 |
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD21 | 12 | 0.05 |
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD22 | 12 | 0.05 |
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD23 | 12 | 0.05 |
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD21 | 21 | 0.05 |
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD22 | 21 | 0.05 |
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD23 | 21 | 0.05 |
| (1,662) | 1:A:49:GLU:HA | 1:A:46:GLN:HA | 4 | 0.05 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB1 | 13 | 0.05 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB2 | 13 | 0.05 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB3 | 13 | 0.05 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB1 | 13 | 0.05 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB2 | 13 | 0.05 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB3 | 13 | 0.05 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB1 | 13 | 0.05 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB2 | 13 | 0.05 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB3 | 13 | 0.05 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB1 | 18 | 0.05 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB2 | 18 | 0.05 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB3 | 18 | 0.05 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB1 | 18 | 0.05 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB2 | 18 | 0.05 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB3 | 18 | 0.05 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB1 | 18 | 0.05 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB2 | 18 | 0.05 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB3 | 18 | 0.05 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD11 | 12 | 0.05 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD12 | 12 | 0.05 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD13 | 12 | 0.05 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD11 | 30 | 0.05 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD12 | 30 | 0.05 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD13 | 30 | 0.05 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD11 | 1:A:43:GLU:HG2 | 8 | 0.05 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD12 | 1:A:43:GLU:HG2 | 8 | 0.05 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD13 | 1:A:43:GLU:HG2 | 8 | 0.05 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD11 | 1:A:43:GLU:HG2 | 17 | 0.05 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD12 | 1:A:43:GLU:HG2 | 17 | 0.05 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD13 | 1:A:43:GLU:HG2 | 17 | 0.05 |
| (1,491) | 1:A:27:LEU:HA | 1:A:66:LEU:H | 29 | 0.05 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD11 | 13 | 0.05 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD12 | 13 | 0.05 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD13 | 13 | 0.05 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD11 | 19 | 0.05 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD12 | 19 | 0.05 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD13 | 19 | 0.05 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD11 | 23 | 0.05 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD12 | 23 | 0.05 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD13 | 23 | 0.05 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD11 | 26 | 0.05 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD12 | 26 | 0.05 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD13 | 26 | 0.05 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD11 | 30 | 0.05 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD12 | 30 | 0.05 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD13 | 30 | 0.05 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD11 | 5 | 0.05 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD12 | 5 | 0.05 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD13 | 5 | 0.05 |
| (1,444) | 1:A:47:ILE:HA | 1:A:50:ARG:HB3 | 5 | 0.05 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:17:LEU:H | 21 | 0.05 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:17:LEU:H | 21 | 0.05 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:17:LEU:H | 21 | 0.05 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:73:SER:H | 21 | 0.05 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:73:SER:H | 21 | 0.05 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:73:SER:H | 21 | 0.05 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:18:GLY:H | 21 | 0.05 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:18:GLY:H | 21 | 0.05 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:18:GLY:H | 21 | 0.05 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:17:LEU:H | 24 | 0.05 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:17:LEU:H | 24 | 0.05 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:17:LEU:H | 24 | 0.05 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:73:SER:H | 24 | 0.05 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:73:SER:H | 24 | 0.05 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:73:SER:H | 24 | 0.05 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:18:GLY:H | 24 | 0.05 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:18:GLY:H | 24 | 0.05 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:18:GLY:H | 24 | 0.05 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:25:ILE:HG13 | 19 | 0.05 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:25:ILE:HG13 | 19 | 0.05 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:25:ILE:HG13 | 19 | 0.05 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:21:ASP:HA | 20 | 0.05 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:21:ASP:HA | 20 | 0.05 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:21:ASP:HA | 20 | 0.05 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:32:ALA:HA | 29 | 0.05 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:32:ALA:HA | 29 | 0.05 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:32:ALA:HA | 29 | 0.05 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:50:ARG:HA | 29 | 0.05 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:50:ARG:HA | 29 | 0.05 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:50:ARG:HA | 29 | 0.05 |
| (1,373) | 1:A:19:ILE:HB | 1:A:19:ILE:H | 21 | 0.05 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG21 | 3 | 0.05 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG22 | 3 | 0.05 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG23 | 3 | 0.05 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG21 | 22 | 0.05 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG22 | 22 | 0.05 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG23 | 22 | 0.05 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 16 | 0.05 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 16 | 0.05 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 16 | 0.05 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 22 | 0.05 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 22 | 0.05 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 22 | 0.05 |
| (1,306) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:38:SER:H | 18 | 0.05 |
| (1,306) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:38:SER:H | 30 | 0.05 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HB2 | 13 | 0.05 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HB2 | 13 | 0.05 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HB2 | 13 | 0.05 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD21 | 1:A:36:LEU:HB2 | 13 | 0.05 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD22 | 1:A:36:LEU:HB2 | 13 | 0.05 |
| (1,294) | 1:A:17:LEU:HD23 | 1:A:36:LEU:HB2 | 13 | 0.05 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 14 | 0.05 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 14 | 0.05 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 14 | 0.05 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 14 | 0.05 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 14 | 0.05 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 14 | 0.05 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 20 | 0.05 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 20 | 0.05 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 20 | 0.05 |
| (1,229) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD21 | 6 | 0.05 |
| (1,229) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD22 | 6 | 0.05 |
| (1,229) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD23 | 6 | 0.05 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,221) | 1:A:31:LEU:HB2 | 1:A:36:LEU:HB2 | 14 | 0.05 |
| (1,221) | 1:A:31:LEU:HB2 | 1:A:36:LEU:HB2 | 23 | 0.05 |
| (1,213) | 1:A:30:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HA | 2 | 0.05 |
| (1,213) | 1:A:30:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HA | 3 | 0.05 |
| (1,213) | 1:A:30:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HA | 9 | 0.05 |
| (1,213) | 1:A:30:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HA | 22 | 0.05 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 15 | 0.05 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 15 | 0.05 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 15 | 0.05 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 22 | 0.05 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 22 | 0.05 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 22 | 0.05 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 23 | 0.05 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 23 | 0.05 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 23 | 0.05 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG21 | 3 | 0.05 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG22 | 3 | 0.05 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG23 | 3 | 0.05 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG21 | 7 | 0.05 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG22 | 7 | 0.05 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG23 | 7 | 0.05 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG21 | 15 | 0.05 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG22 | 15 | 0.05 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG23 | 15 | 0.05 |
| (1,1710) | 1:A:63:GLN:H | 1:A:64:LEU:H | 5 | 0.05 |
| (1,1710) | 1:A:63:GLN:H | 1:A:64:LEU:H | 7 | 0.05 |
| (1,1710) | 1:A:63:GLN:H | 1:A:64:LEU:H | 8 | 0.05 |
| (1,1710) | 1:A:63:GLN:H | 1:A:64:LEU:H | 18 | 0.05 |
| (1,1710) | 1:A:63:GLN:H | 1:A:64:LEU:H | 21 | 0.05 |
| (1,1710) | 1:A:63:GLN:H | 1:A:64:LEU:H | 22 | 0.05 |
| (1,1710) | 1:A:63:GLN:H | 1:A:64:LEU:H | 25 | 0.05 |
| (1,171) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:21:ASP:HA | 22 | 0.05 |
| (1,1701) | 1:A:47:ILE:H | 1:A:48:LEU:H | 1 | 0.05 |
| (1,1701) | 1:A:47:ILE:H | 1:A:48:LEU:H | 15 | 0.05 |
| (1,1701) | 1:A:47:ILE:H | 1:A:48:LEU:H | 28 | 0.05 |
| (1,1692) | 1:A:33:ASP:H | 1:A:36:LEU:H | 17 | 0.05 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG21 | 1 | 0.05 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG22 | 1 | 0.05 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG23 | 1 | 0.05 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG21 | 2 | 0.05 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG22 | 2 | 0.05 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG23 | 2 | 0.05 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG21 | 26 | 0.05 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG22 | 26 | 0.05 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG23 | 26 | 0.05 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG21 | 28 | 0.05 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG22 | 28 | 0.05 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG23 | 28 | 0.05 |
| (1,1628) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:9:LEU:HD11 | 13 | 0.05 |
| (1,1628) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:9:LEU:HD12 | 13 | 0.05 |
| (1,1628) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:9:LEU:HD13 | 13 | 0.05 |
| (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 24 | 0.05 |
| (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 24 | 0.05 |
| (1,1599) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:40:MET:HG2 | 11 | 0.05 |
| (1,1599) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:40:MET:HG2 | 11 | 0.05 |
| (1,1599) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:40:MET:HG2 | 11 | 0.05 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 2 | 0.05 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB3 | 1:A:64:LEU:H | 2 | 0.05 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:29:SER:HA | 18 | 0.05 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:29:SER:HA | 18 | 0.05 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:29:SER:HA | 18 | 0.05 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG2 | 1:A:75:LYS:HE2 | 23 | 0.05 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG2 | 1:A:75:LYS:HE3 | 23 | 0.05 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG3 | 1:A:75:LYS:HE2 | 23 | 0.05 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG3 | 1:A:75:LYS:HE3 | 23 | 0.05 |
| (1,1579) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:11:LYS:HE2 | 19 | 0.05 |
| (1,1579) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:11:LYS:HE3 | 19 | 0.05 |
| (1,1579) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:11:LYS:HE2 | 19 | 0.05 |
| (1,1579) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:11:LYS:HE3 | 19 | 0.05 |
| (1,1579) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:11:LYS:HE2 | 19 | 0.05 |
| (1,1579) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:11:LYS:HE3 | 19 | 0.05 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:65:THR:HA | 5 | 0.05 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:65:THR:HA | 5 | 0.05 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:65:THR:HA | 5 | 0.05 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:65:THR:HA | 10 | 0.05 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:65:THR:HA | 10 | 0.05 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:65:THR:HA | 10 | 0.05 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:65:THR:HA | 16 | 0.05 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:65:THR:HA | 16 | 0.05 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:65:THR:HA | 16 | 0.05 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:65:THR:HA | 19 | 0.05 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:65:THR:HA | 19 | 0.05 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:65:THR:HA | 19 | 0.05 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:65:THR:HA | 23 | 0.05 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|---------------|-------|---------------|
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:65:THR:HA | 23 | 0.05 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:65:THR:HA | 23 | 0.05 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:65:THR:HA | 24 | 0.05 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:65:THR:HA | 24 | 0.05 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:65:THR:HA | 24 | 0.05 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:65:THR:HA | 25 | 0.05 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:65:THR:HA | 25 | 0.05 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:65:THR:HA | 25 | 0.05 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:65:THR:HA | 26 | 0.05 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:65:THR:HA | 26 | 0.05 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:65:THR:HA | 26 | 0.05 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:65:THR:HA | 27 | 0.05 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:65:THR:HA | 27 | 0.05 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:65:THR:HA | 27 | 0.05 |
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:13:VAL:H | 10 | 0.05 |
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:13:VAL:H | 10 | 0.05 |
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:13:VAL:H | 10 | 0.05 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:26:ASN:H | 2 | 0.05 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:26:ASN:H | 2 | 0.05 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:26:ASN:H | 2 | 0.05 |
| (1,1552) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:24:GLY:H | 10 | 0.05 |
| (1,1552) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:24:GLY:H | 10 | 0.05 |
| (1,1552) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:24:GLY:H | 10 | 0.05 |
| (1,1552) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:24:GLY:H | 17 | 0.05 |
| (1,1552) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:24:GLY:H | 17 | 0.05 |
| (1,1552) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:24:GLY:H | 17 | 0.05 |
| (1,1551) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:17:LEU:H | 7 | 0.05 |
| (1,1551) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:17:LEU:H | 7 | 0.05 |
| (1,1551) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:17:LEU:H | 7 | 0.05 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:40:MET:HA | 7 | 0.05 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:40:MET:HA | 7 | 0.05 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:40:MET:HA | 7 | 0.05 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:40:MET:HA | 16 | 0.05 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:40:MET:HA | 16 | 0.05 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:40:MET:HA | 16 | 0.05 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:42:VAL:HA | 14 | 0.05 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:42:VAL:HA | 14 | 0.05 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:42:VAL:HA | 14 | 0.05 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:42:VAL:HA | 15 | 0.05 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:42:VAL:HA | 15 | 0.05 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:42:VAL:HA | 15 | 0.05 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:42:VAL:HA | 24 | 0.05 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|-------|---------------|
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:42:VAL:HA | 24 | 0.05 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:42:VAL:HA | 24 | 0.05 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:42:VAL:HA | 30 | 0.05 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:42:VAL:HA | 30 | 0.05 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:42:VAL:HA | 30 | 0.05 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:45:ARG:HE | 5 | 0.05 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG22 | 1:A:45:ARG:HE | 5 | 0.05 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG23 | 1:A:45:ARG:HE | 5 | 0.05 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:45:ARG:HE | 17 | 0.05 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG22 | 1:A:45:ARG:HE | 17 | 0.05 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG23 | 1:A:45:ARG:HE | 17 | 0.05 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:45:ARG:HE | 21 | 0.05 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG22 | 1:A:45:ARG:HE | 21 | 0.05 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG23 | 1:A:45:ARG:HE | 21 | 0.05 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:45:ARG:HE | 28 | 0.05 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG22 | 1:A:45:ARG:HE | 28 | 0.05 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG23 | 1:A:45:ARG:HE | 28 | 0.05 |
| (1,1523) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:70:GLN:H | 14 | 0.05 |
| (1,1523) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:70:GLN:H | 23 | 0.05 |
| (1,1523) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:70:GLN:H | 27 | 0.05 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD2 | 5 | 0.05 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD3 | 5 | 0.05 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 5 | 0.05 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 5 | 0.05 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD2 | 5 | 0.05 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD3 | 5 | 0.05 |
| (1,1498) | 1:A:67:ARG:HD2 | 1:A:69:LEU:H | 8 | 0.05 |
| (1,1498) | 1:A:67:ARG:HD2 | 1:A:69:LEU:H | 13 | 0.05 |
| (1,1498) | 1:A:67:ARG:HD2 | 1:A:69:LEU:H | 22 | 0.05 |
| (1,1498) | 1:A:67:ARG:HD2 | 1:A:69:LEU:H | 28 | 0.05 |
| (1,1497) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:63:GLN:HB2 | 19 | 0.05 |
| (1,1497) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:63:GLN:HB2 | 19 | 0.05 |
| (1,1497) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:63:GLN:HB2 | 19 | 0.05 |
| (1,1494) | 1:A:46:GLN:HG2 | 1:A:50:ARG:HD2 | 30 | 0.05 |
| (1,1494) | 1:A:46:GLN:HG2 | 1:A:50:ARG:HD3 | 30 | 0.05 |
| (1,1493) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:50:ARG:HD2 | 4 | 0.05 |
| (1,1493) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:50:ARG:HD3 | 4 | 0.05 |
| (1,1493) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:50:ARG:HD2 | 29 | 0.05 |
| (1,1493) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:50:ARG:HD3 | 29 | 0.05 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:46:GLN:HG2 | 17 | 0.05 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:46:GLN:HG2 | 17 | 0.05 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:46:GLN:HG2 | 17 | 0.05 |



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

| (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 3 0.05 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 3 0.05 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 3 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:V | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|--|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 3 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:AHB3 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A | (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:19:ILE:HB | 3 | 0.05 |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1: | (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:19:ILE:HB | 3 | 0.05 |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1: | (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:19:ILE:HB | 3 | 0.05 |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 1 0 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 1 0 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 1 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1491) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1491) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 7 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 16 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 16 0.05 (1,140 | (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG11 | 2 | 0.05 |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1: | (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG12 | 2 | 0.05 |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1 | (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG13 | 2 | 0.05 |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 | (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG11 | 2 | 0.05 |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 | (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG12 | 2 | 0.05 |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 <t< td=""><td>(1,1481)</td><td>1:A:14:ALA:HB2</td><td>1:A:13:VAL:HG13</td><td>2</td><td>0.05</td></t<> | (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG13 | 2 | 0.05 |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 2 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 < | (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG11 | 2 | 0.05 |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 <t< td=""><td>(1,1481)</td><td>1:A:14:ALA:HB3</td><td>1:A:13:VAL:HG12</td><td>2</td><td>0.05</td></t<> | (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG12 | 2 | 0.05 |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 < | (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG13 | 2 | 0.05 |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 | (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG11 | 6 | 0.05 |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 | (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG12 | 6 | 0.05 |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 | (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG13 | 6 | 0.05 |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 | (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG11 | 6 | 0.05 |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 | (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG12 | 6 | 0.05 |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 | (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG13 | 6 | 0.05 |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 6 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:13:VAL:HB3 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA | (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG11 | 6 | 0.05 |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 2 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA < | (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG12 | 6 | 0.05 |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 2 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 8 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA | (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG13 | 6 | 0.05 |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1447) 1:A:42:VAL:HG13 1:A:47:LEU:HG 16 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 2 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 8 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA <td< td=""><td>(1,1481)</td><td>1:A:14:ALA:HB1</td><td>1:A:13:VAL:HG11</td><td>12</td><td>0.05</td></td<> | (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG11 | 12 | 0.05 |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 2 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 7 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 16 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1 | (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG12 | 12 | 0.05 |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1447) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1447) 1:A:42:VAL:HG13 1:A:45:ARG:HB3 2 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 7 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 8 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 16 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 23 0.05 (1,1393) 1:A:44:VAL:HA 1:A: | (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG13 | 12 | 0.05 |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 2 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 7 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 16 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 23 0.05 (1,1393) 1:A:44:VAL:HA 1:A:48:LEU:HG 28 0.05 (1,1354) 1:A:69:LEU:HD21 1:A:67:ARG:HD3 15 0.05 | (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG11 | 12 | 0.05 |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 2 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 7 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 8 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 16 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 23 0.05 (1,1393) 1:A:44:VAL:HA 1:A:48:LEU:HG 28 0.05 (1,1354) 1:A:69:LEU:HD21 1:A:67:ARG:HD3 15 0.05 | (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG12 | 12 | 0.05 |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 12 0.05 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 2 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 7 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 8 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 16 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 16 0.05 (1,1393) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 23 0.05 (1,1354) 1:A:69:LEU:HD21 1:A:67:ARG:HD3 15 0.05 | (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG13 | 12 | 0.05 |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 12 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 2 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 7 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 8 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 16 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 23 0.05 (1,1393) 1:A:44:VAL:HA 1:A:48:LEU:HG 28 0.05 (1,1354) 1:A:69:LEU:HD21 1:A:67:ARG:HD3 15 0.05 | (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG11 | 12 | 0.05 |
| (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 2 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 7 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 8 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 16 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 23 0.05 (1,1393) 1:A:44:VAL:HA 1:A:48:LEU:HG 28 0.05 (1,1354) 1:A:69:LEU:HD21 1:A:67:ARG:HD3 15 0.05 | (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG12 | 12 | 0.05 |
| (1,1447) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 2 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 7 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 8 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 16 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 23 0.05 (1,1393) 1:A:44:VAL:HA 1:A:48:LEU:HG 28 0.05 (1,1354) 1:A:69:LEU:HD21 1:A:67:ARG:HD3 15 0.05 | (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG13 | 12 | 0.05 |
| (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 16 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 2 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 7 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 8 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 16 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 23 0.05 (1,1393) 1:A:44:VAL:HA 1:A:48:LEU:HG 28 0.05 (1,1354) 1:A:69:LEU:HD21 1:A:67:ARG:HD3 15 0.05 | (1,1447) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:17:LEU:HG | 16 | 0.05 |
| (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 2 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 7 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 8 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 16 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 23 0.05 (1,1393) 1:A:44:VAL:HA 1:A:48:LEU:HG 28 0.05 (1,1354) 1:A:69:LEU:HD21 1:A:67:ARG:HD3 15 0.05 | (1,1447) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:17:LEU:HG | 16 | 0.05 |
| (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 7 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 8 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 16 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 23 0.05 (1,1393) 1:A:44:VAL:HA 1:A:48:LEU:HG 28 0.05 (1,1354) 1:A:69:LEU:HD21 1:A:67:ARG:HD3 15 0.05 | (1,1447) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:17:LEU:HG | 16 | 0.05 |
| (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 8 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 16 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 23 0.05 (1,1393) 1:A:44:VAL:HA 1:A:48:LEU:HG 28 0.05 (1,1354) 1:A:69:LEU:HD21 1:A:67:ARG:HD3 15 0.05 | (1,1402) | | 1:A:45:ARG:HB3 | 2 | 0.05 |
| (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 16 0.05 (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 23 0.05 (1,1393) 1:A:44:VAL:HA 1:A:48:LEU:HG 28 0.05 (1,1354) 1:A:69:LEU:HD21 1:A:67:ARG:HD3 15 0.05 | (1,1402) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:ARG:HB3 | 7 | 0.05 |
| (1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 23 0.05 (1,1393) 1:A:44:VAL:HA 1:A:48:LEU:HG 28 0.05 (1,1354) 1:A:69:LEU:HD21 1:A:67:ARG:HD3 15 0.05 | (1,1402) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:ARG:HB3 | 8 | 0.05 |
| (1,1393) 1:A:44:VAL:HA 1:A:48:LEU:HG 28 0.05 (1,1354) 1:A:69:LEU:HD21 1:A:67:ARG:HD3 15 0.05 | (1,1402) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:ARG:HB3 | 16 | 0.05 |
| (1,1354) 1:A:69:LEU:HD21 1:A:67:ARG:HD3 15 0.05 | (1,1402) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:ARG:HB3 | 23 | 0.05 |
| | (1,1393) | 1:A:44:VAL:HA | 1:A:48:LEU:HG | 28 | 0.05 |
| | (1,1354) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:67:ARG:HD3 | 15 | 0.05 |
| (1,1354) 1:A:69:LEU:HD22 1:A:67:ARG:HD3 15 0.05 | (1,1354) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:67:ARG:HD3 | 15 | 0.05 |
| (1,1354) 1:A:69:LEU:HD23 1:A:67:ARG:HD3 15 0.05 | (1,1354) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:67:ARG:HD3 | 15 | 0.05 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1303) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:31:LEU:HB3 | 11 | 0.05 |
| (1,1296) | 1:A:63:GLN:HA | 1:A:32:ALA:HB1 | 27 | 0.05 |
| (1,1296) | 1:A:63:GLN:HA | 1:A:32:ALA:HB2 | 27 | 0.05 |
| (1,1296) | 1:A:63:GLN:HA | 1:A:32:ALA:HB3 | 27 | 0.05 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:57:PRO:HB3 | 9 | 0.05 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:57:PRO:HB3 | 9 | 0.05 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:57:PRO:HB3 | 9 | 0.05 |
| (1,1204) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:61:VAL:HB | 28 | 0.05 |
| (1,1195) | 1:A:56:LEU:HG | 1:A:56:LEU:H | 14 | 0.05 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HB2 | 7 | 0.05 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HG2 | 7 | 0.05 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HB2 | 28 | 0.05 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HG2 | 28 | 0.05 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HB2 | 29 | 0.05 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HG2 | 29 | 0.05 |
| (1,1172) | 1:A:55:VAL:HA | 1:A:57:PRO:HG3 | 1 | 0.05 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:51:GLU:HB2 | 8 | 0.05 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:51:GLU:HB2 | 8 | 0.05 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:51:GLU:HB2 | 8 | 0.05 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:51:GLU:HB2 | 30 | 0.05 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:51:GLU:HB2 | 30 | 0.05 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:51:GLU:HB2 | 30 | 0.05 |
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:52:HIS:HB3 | 13 | 0.05 |
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:52:HIS:HB3 | 13 | 0.05 |
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:52:HIS:HB3 | 13 | 0.05 |
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:52:HIS:HB3 | 18 | 0.05 |
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:52:HIS:HB3 | 18 | 0.05 |
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:52:HIS:HB3 | 18 | 0.05 |
| (1,1160) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HA | 17 | 0.05 |
| (1,1160) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HA | 17 | 0.05 |
| (1,1160) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HA | 17 | 0.05 |
| (1,1158) | 1:A:54:LEU:HB3 | 1:A:48:LEU:HB3 | 4 | 0.05 |
| (1,1158) | 1:A:54:LEU:HB3 | 1:A:48:LEU:HB3 | 21 | 0.05 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG21 | 15 | 0.05 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG22 | 15 | 0.05 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG23 | 15 | 0.05 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG21 | 15 | 0.05 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG22 | 15 | 0.05 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG23 | 15 | 0.05 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG21 | 15 | 0.05 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG22 | 15 | 0.05 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG23 | 15 | 0.05 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG21 | 25 | 0.05 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG22 | 25 | 0.05 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG23 | 25 | 0.05 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG21 | 25 | 0.05 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG22 | 25 | 0.05 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG23 | 25 | 0.05 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG21 | 25 | 0.05 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG22 | 25 | 0.05 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG23 | 25 | 0.05 |
| (1,1037) | 1:A:36:LEU:HB3 | 1:A:40:MET:HA | 24 | 0.05 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:31:LEU:HA | 22 | 0.05 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:31:LEU:HA | 22 | 0.05 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:31:LEU:HA | 22 | 0.05 |
| (1,1016) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:29:SER:H | 11 | 0.05 |
| (1,1016) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:29:SER:H | 11 | 0.05 |
| (1,1016) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:29:SER:H | 11 | 0.05 |
| (1,1016) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:29:SER:H | 30 | 0.05 |
| (1,1016) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:29:SER:H | 30 | 0.05 |
| (1,1016) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:29:SER:H | 30 | 0.05 |
| (1,999) | 1:A:33:ASP:HB3 | 1:A:35:GLY:H | 6 | 0.04 |
| (1,996) | 1:A:33:ASP:HB2 | 1:A:29:SER:HB2 | 16 | 0.04 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:70:GLN:HE21 | 6 | 0.04 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:70:GLN:HE21 | 6 | 0.04 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:70:GLN:HE21 | 6 | 0.04 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:70:GLN:HE21 | 10 | 0.04 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:70:GLN:HE21 | 10 | 0.04 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:70:GLN:HE21 | 10 | 0.04 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:70:GLN:HE21 | 18 | 0.04 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:70:GLN:HE21 | 18 | 0.04 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:70:GLN:HE21 | 18 | 0.04 |
| (1,971) | 1:A:27:LEU:HD11 | 1:A:25:ILE:H | 22 | 0.04 |
| (1,971) | 1:A:27:LEU:HD12 | 1:A:25:ILE:H | 22 | 0.04 |
| (1,971) | 1:A:27:LEU:HD13 | 1:A:25:ILE:H | 22 | 0.04 |
| (1,971) | 1:A:27:LEU:HD11 | 1:A:25:ILE:H | 29 | 0.04 |
| (1,971) | 1:A:27:LEU:HD12 | 1:A:25:ILE:H | 29 | 0.04 |
| (1,971) | 1:A:27:LEU:HD13 | 1:A:25:ILE:H | 29 | 0.04 |
| (1,97) | 1:A:52:HIS:HB2 | 1:A:54:LEU:HB3 | 8 | 0.04 |
| (1,939) | 1:A:57:PRO:HD2 | 1:A:60:GLU:HG2 | 15 | 0.04 |
| (1,939) | 1:A:57:PRO:HD2 | 1:A:60:GLU:HG3 | 15 | 0.04 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 1 | 0.04 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 1 | 0.04 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 1 | 0.04 |



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

| (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD21 23 0.04 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD22 23 0.04 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 23 0.04 (1,862) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 26 0.04 (1,705) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:10:VAL:HG22 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 21 0.04 (1,740) 1:A:63:GLN:HA3 1:A:60:GLU:H | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|--|---------|----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7-ARG:HG2 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7-ARG:HG2 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7-ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7-ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7-ARG:HG3 30 | (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 23 | 0.04 |
| (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 25 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,82) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:10:VAL:HG22 3 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:10:VAL:HG22 1 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:10:VAL:HG22 1 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:10:VAL:HG22 1 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:10:VAL:HG22 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:10:VAL:HG22 1 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 14 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 15 0.04 (1,740) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:60:GLU:HA 15 0.04 (1,766) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59: | (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 23 | 0.04 |
| (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:73-RG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:74-RG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:74-RG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:74-RG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:74-RG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:74-RG:HG3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:74-RG:HG3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:74-RG:HG3 30 | (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 23 | 0.04 |
| (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:73:ARG:HG3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 | (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:9:LEU:HB3 | 20 | 0.04 |
| (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:73:RG:HG2 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:73:RG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:73:RG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:73:RG:HG2 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:73:RG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:73:RG:HG3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:73:RG:HG3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:73:RG:HG3 30 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,754) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:10:VAL:HG21 21 0.04 (1,740) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 14 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 14 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG | (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG2 | 20 | 0.04 |
| (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,82) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG22 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG23 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:72:MET:H 7 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG21 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 21 0.04 (1,740) 1:A:63:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 21 0.04 (1,740) 1:A:63:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 21 0.04 (1,740) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,740) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,740) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,740) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 14 0.04 (1,766) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,766) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,766) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 (1,766) 1:A:59:ARG:H | (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG3 | 20 | 0.04 |
| (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG22 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:10:VAL:HG23 3 0.04 (1,754) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:10:VAL:HG23 3 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:10:VAL:HG23 3 0.04 (1,750) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:10:VAL:HG23 3 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:10:VAL:HG23 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:10:VAL:HG23 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:10:VAL:HG23 21 0.04 (1,740) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,716) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 27 0.04 (1,716) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 27 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD | (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:9:LEU:HB3 | 23 | 0.04 |
| (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG22 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG22 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:70:VAL:HG23 3 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:70:VAL:HG21 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:10:VAL:HG22 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:10:VAL:HG22 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 14 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 15 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 15 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 16 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 17 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 14 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 15 0.04 (1,716) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A | (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG2 | 23 | 0.04 |
| (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 30 0.04 (1,80) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG22 3 0.04 (1,754) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:72:MET:H 7 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:10:VAL:HG21 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 21 0.04 (1,740) 1:A:63:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 21 0.04 (1,740) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,740) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,740) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 14 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 15 0.04 (1,740) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,766) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,766) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,766) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 (1,766) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 (1,766) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 (1,766) 1:A:59:ARG | (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG3 | 23 | 0.04 |
| (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:73:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:73:ARG:HG2 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:73:ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:74:ARG:HG2 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:74:ARG:HG3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:74:ARG:HG3 30 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 | (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:9:LEU:HB3 | 24 | 0.04 |
| (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,80) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG22 3 0.04 (1,754) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:72:MET:H 7 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 21 0.04 (1,740) 1:A:63:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 21 0.04 (1,740) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,740) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,740) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 11 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 (1,706) 1:A:5 | (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG2 | 24 | 0.04 |
| (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG22 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG23 3 0.04 (1,754) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:72:MET:H 7 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG21 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 21 0.04 (1,740) 1:A:63:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 21 0.04 (1,740) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 14 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 14 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 14 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 15 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 11 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG | (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG3 | 24 | 0.04 |
| (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:72:MET:H | (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:9:LEU:HB3 | 28 | 0.04 |
| (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG22 | (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG2 | 28 | 0.04 |
| (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,750) 1:A:60:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 | (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG3 | 28 | 0.04 |
| (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,750) 1:A:60:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:60:GLHG2 | (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:9:LEU:HB3 | 30 | 0.04 |
| (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,755) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA <td>(1,82)</td> <td>1:A:73:SER:HB2</td> <td>1:A:7:ARG:HG2</td> <td>30</td> <td>0.04</td> | (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG2 | 30 | 0.04 |
| (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,755) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,754) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:10:VAL:HG21 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22< | , | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG3 | 30 | 0.04 |
| (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG22 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG23 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG23 3 0.04 (1,754) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:72:MET:H 7 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG21 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 21 0.04 (1,740) 1:A:63:GLN:HA 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA | (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD11 | 25 | 0.04 |
| (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG22 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG23 3 0.04 (1,754) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:72:MET:H 7 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG21 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 21 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HA 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 14 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 25 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:59:ARG:H | (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD12 | 25 | 0.04 |
| (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG22 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG23 3 0.04 (1,754) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:72:MET:H 7 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG21 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 21 0.04 (1,740) 1:A:63:GLN:HA 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 14 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 25 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 27 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H | (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD13 | 25 | 0.04 |
| (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG22 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG23 3 0.04 (1,754) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:72:MET:H 7 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG21 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 25 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 25 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H < | (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD11 | 26 | 0.04 |
| (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG22 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG23 3 0.04 (1,754) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:72:MET:H 7 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG21 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 21 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 14 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 25 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 25 0.04 (1,705) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 27 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H < | (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD12 | 26 | 0.04 |
| (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG22 3 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG23 3 0.04 (1,754) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:72:MET:H 7 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG21 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 21 0.04 (1,740) 1:A:63:GLN:HA 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 14 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 25 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 16 0.04 (1,705) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 25 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 1 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 1< | (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD13 | 26 | 0.04 |
| (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG23 3 0.04 (1,754) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:72:MET:H 7 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG21 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 21 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 14 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 25 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 25 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 16 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 1 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 | (1,755) | 1:A:70:GLN:HG2 | 1:A:10:VAL:HG21 | 3 | 0.04 |
| (1,754) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:72:MET:H 7 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG21 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 21 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 14 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 25 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 25 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 16 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 27 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 1 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 | (1,755) | 1:A:70:GLN:HG2 | 1:A:10:VAL:HG22 | 3 | 0.04 |
| (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG21 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:60:VAL:HG23 21 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 14 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 25 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 16 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 27 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 | (1,755) | 1:A:70:GLN:HG2 | 1:A:10:VAL:HG23 | 3 | 0.04 |
| (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 21 0.04 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 21 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 14 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 25 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 16 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 27 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 | (1,754) | 1:A:70:GLN:HG3 | 1:A:72:MET:H | 7 | 0.04 |
| (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 21 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 14 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 25 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 16 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 27 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 1 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 | (1,740) | 1:A:70:GLN:HA | 1:A:10:VAL:HG21 | 21 | 0.04 |
| (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 14 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 25 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 16 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 27 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 11 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 | (1,740) | 1:A:70:GLN:HA | 1:A:10:VAL:HG22 | 21 | 0.04 |
| (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 14 0.04 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 25 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 16 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 27 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 11 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 | (1,740) | 1:A:70:GLN:HA | 1:A:10:VAL:HG23 | 21 | 0.04 |
| (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 25 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 16 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 27 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 11 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 | (1,732) | 1:A:63:GLN:HG3 | 1:A:60:GLU:HA | 12 | 0.04 |
| (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 25 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 16 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 27 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 11 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 | (1,732) | 1:A:63:GLN:HG3 | 1:A:60:GLU:HA | 14 | 0.04 |
| (1,715) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 16 0.04 (1,715) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 27 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 11 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 | | 1:A:63:GLN:HG3 | 1:A:60:GLU:HA | 25 | 0.04 |
| (1,715) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 27 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 11 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 | | 1:A:63:GLN:HB3 | 1:A:60:GLU:HA | 16 | 0.04 |
| (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 11 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 | | 1:A:63:GLN:HB3 | 1:A:60:GLU:HA | 27 | |
| (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 3 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 11 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 | / | 1:A:59:ARG:HD2 | 1:A:59:ARG:H | 3 | 0.04 |
| (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 11 0.04 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 | | 1:A:59:ARG:HD3 | 1:A:59:ARG:H | | 0.04 |
| (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 11 0.04 | | | 1:A:59:ARG:H | | 0.04 |
| | | | 1:A:59:ARG:H | 11 | 0.04 |
| $(1,100)$ $1:A:09:ARG:\PiDZ$ $1:A:09:ARG:\Pi$ $1Z$ $0:04$ | (1,706) | 1:A:59:ARG:HD2 | 1:A:59:ARG:H | 12 | 0.04 |
| (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 12 0.04 | | | | | |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,706) | 1:A:59:ARG:HD2 | 1:A:59:ARG:H | 15 | 0.04 |
| (1,706) | 1:A:59:ARG:HD3 | 1:A:59:ARG:H | 15 | 0.04 |
| (1,706) | 1:A:59:ARG:HD2 | 1:A:59:ARG:H | 17 | 0.04 |
| (1,706) | 1:A:59:ARG:HD3 | 1:A:59:ARG:H | 17 | 0.04 |
| (1,706) | 1:A:59:ARG:HD2 | 1:A:59:ARG:H | 26 | 0.04 |
| (1,706) | 1:A:59:ARG:HD3 | 1:A:59:ARG:H | 26 | 0.04 |
| (1,70) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:72:MET:H | 28 | 0.04 |
| (1,70) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:72:MET:H | 28 | 0.04 |
| (1,70) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:72:MET:H | 28 | 0.04 |
| (1,70) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:71:GLU:H | 28 | 0.04 |
| (1,70) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:71:GLU:H | 28 | 0.04 |
| (1,70) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:71:GLU:H | 28 | 0.04 |
| (1,691) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:47:ILE:HD11 | 26 | 0.04 |
| (1,691) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:47:ILE:HD12 | 26 | 0.04 |
| (1,691) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:47:ILE:HD13 | 26 | 0.04 |
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD21 | 26 | 0.04 |
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD22 | 26 | 0.04 |
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD23 | 26 | 0.04 |
| (1,662) | 1:A:49:GLU:HA | 1:A:46:GLN:HA | 1 | 0.04 |
| (1,662) | 1:A:49:GLU:HA | 1:A:46:GLN:HA | 3 | 0.04 |
| (1,662) | 1:A:49:GLU:HA | 1:A:46:GLN:HA | 29 | 0.04 |
| (1,607) | 1:A:67:ARG:HA | 1:A:67:ARG:HD3 | 12 | 0.04 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:66:LEU:HA | 16 | 0.04 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:66:LEU:HA | 16 | 0.04 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:66:LEU:HA | 16 | 0.04 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:66:LEU:HA | 28 | 0.04 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:66:LEU:HA | 28 | 0.04 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:66:LEU:HA | 28 | 0.04 |
| (1,59) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:64:LEU:HB2 | 26 | 0.04 |
| (1,59) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:64:LEU:HB2 | 26 | 0.04 |
| (1,59) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:64:LEU:HB2 | 26 | 0.04 |
| (1,59) | 1:A:66:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HB2 | 26 | 0.04 |
| (1,59) | 1:A:66:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HB2 | 26 | 0.04 |
| (1,59) | 1:A:66:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HB2 | 26 | 0.04 |
| (1,58) | 1:A:66:LEU:HD21 | 1:A:10:VAL:HB | 14 | 0.04 |
| (1,58) | 1:A:66:LEU:HD22 | 1:A:10:VAL:HB | 14 | 0.04 |
| (1,58) | 1:A:66:LEU:HD23 | 1:A:10:VAL:HB | 14 | 0.04 |
| (1,58) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:43:GLU:HB2 | 14 | 0.04 |
| (1,58) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:43:GLU:HB2 | 14 | 0.04 |
| (1,58) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:43:GLU:HB2 | 14 | 0.04 |
| (1,58) | 1:A:66:LEU:HD21 | 1:A:10:VAL:HB | 16 | 0.04 |
| (1,58) | 1:A:66:LEU:HD22 | 1:A:10:VAL:HB | 16 | 0.04 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,58) | 1:A:66:LEU:HD23 | 1:A:10:VAL:HB | 16 | 0.04 |
| (1,58) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:43:GLU:HB2 | 16 | 0.04 |
| (1,58) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:43:GLU:HB2 | 16 | 0.04 |
| (1,58) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:43:GLU:HB2 | 16 | 0.04 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB1 | 8 | 0.04 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB2 | 8 | 0.04 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB3 | 8 | 0.04 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB1 | 8 | 0.04 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB2 | 8 | 0.04 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB3 | 8 | 0.04 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB1 | 8 | 0.04 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB2 | 8 | 0.04 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB3 | 8 | 0.04 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB1 | 15 | 0.04 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB2 | 15 | 0.04 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB3 | 15 | 0.04 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB1 | 15 | 0.04 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB2 | 15 | 0.04 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB3 | 15 | 0.04 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB1 | 15 | 0.04 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB2 | 15 | 0.04 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB3 | 15 | 0.04 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD11 | 18 | 0.04 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD12 | 18 | 0.04 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD13 | 18 | 0.04 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD11 | 1:A:43:GLU:HG2 | 13 | 0.04 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD12 | 1:A:43:GLU:HG2 | 13 | 0.04 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD13 | 1:A:43:GLU:HG2 | 13 | 0.04 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD11 | 1:A:43:GLU:HG2 | 25 | 0.04 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD12 | 1:A:43:GLU:HG2 | 25 | 0.04 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD13 | 1:A:43:GLU:HG2 | 25 | 0.04 |
| (1,491) | 1:A:27:LEU:HA | 1:A:66:LEU:H | 25 | 0.04 |
| (1,479) | 1:A:23:ALA:HA | 1:A:21:ASP:HA | 2 | 0.04 |
| (1,479) | 1:A:23:ALA:HA | 1:A:21:ASP:HA | 13 | 0.04 |
| (1,479) | 1:A:23:ALA:HA | 1:A:21:ASP:HA | 14 | 0.04 |
| (1,479) | 1:A:23:ALA:HA | 1:A:21:ASP:HA | 25 | 0.04 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:20:ARG:HB2 | 20 | 0.04 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:20:ARG:HB2 | 20 | 0.04 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:20:ARG:HB2 | 20 | 0.04 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:20:ARG:HB2 | 21 | 0.04 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:20:ARG:HB2 | 21 | 0.04 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:20:ARG:HB2 | 21 | 0.04 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD11 | 11 | 0.04 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD12 | 11 | 0.04 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD13 | 11 | 0.04 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD11 | 28 | 0.04 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD12 | 28 | 0.04 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD13 | 28 | 0.04 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD11 | 29 | 0.04 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD12 | 29 | 0.04 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD13 | 29 | 0.04 |
| (1,456) | 1:A:47:ILE:HB | 1:A:50:ARG:H | 13 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:11:LYS:HE2 | 8 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:11:LYS:HE3 | 8 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:11:LYS:HE2 | 8 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:11:LYS:HE3 | 8 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:11:LYS:HE2 | 8 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:11:LYS:HE3 | 8 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:68:LYS:HE2 | 8 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:68:LYS:HE3 | 8 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:68:LYS:HE2 | 8 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:68:LYS:HE3 | 8 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:68:LYS:HE2 | 8 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:68:LYS:HE3 | 8 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:11:LYS:HE2 | 19 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:11:LYS:HE3 | 19 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:11:LYS:HE2 | 19 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:11:LYS:HE3 | 19 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:11:LYS:HE2 | 19 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:11:LYS:HE3 | 19 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:68:LYS:HE2 | 19 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:68:LYS:HE3 | 19 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:68:LYS:HE2 | 19 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:68:LYS:HE3 | 19 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:68:LYS:HE2 | 19 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:68:LYS:HE3 | 19 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:11:LYS:HE2 | 23 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:11:LYS:HE3 | 23 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:11:LYS:HE2 | 23 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:11:LYS:HE3 | 23 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:11:LYS:HE2 | 23 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:11:LYS:HE3 | 23 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:68:LYS:HE2 | 23 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:68:LYS:HE3 | 23 | 0.04 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|--------|-----------------|----------------|-------|---------------|
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:68:LYS:HE2 | 23 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:68:LYS:HE3 | 23 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:68:LYS:HE2 | 23 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:68:LYS:HE3 | 23 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:11:LYS:HE2 | 28 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:11:LYS:HE3 | 28 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:11:LYS:HE2 | 28 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:11:LYS:HE3 | 28 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:11:LYS:HE2 | 28 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:11:LYS:HE3 | 28 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:68:LYS:HE2 | 28 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:68:LYS:HE3 | 28 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:68:LYS:HE2 | 28 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:68:LYS:HE3 | 28 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:68:LYS:HE2 | 28 | 0.04 |
| (1,45) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:68:LYS:HE3 | 28 | 0.04 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:17:LEU:H | 14 | 0.04 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:17:LEU:H | 14 | 0.04 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:17:LEU:H | 14 | 0.04 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:73:SER:H | 14 | 0.04 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:73:SER:H | 14 | 0.04 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:73:SER:H | 14 | 0.04 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:18:GLY:H | 14 | 0.04 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:18:GLY:H | 14 | 0.04 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:18:GLY:H | 14 | 0.04 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:32:ALA:HA | 12 | 0.04 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:32:ALA:HA | 12 | 0.04 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:32:ALA:HA | 12 | 0.04 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:50:ARG:HA | 12 | 0.04 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:50:ARG:HA | 12 | 0.04 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:50:ARG:HA | 12 | 0.04 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:32:ALA:HA | 13 | 0.04 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:32:ALA:HA | 13 | 0.04 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:32:ALA:HA | 13 | 0.04 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:50:ARG:HA | 13 | 0.04 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:50:ARG:HA | 13 | 0.04 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:50:ARG:HA | 13 | 0.04 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:32:ALA:HA | 28 | 0.04 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:32:ALA:HA | 28 | 0.04 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:32:ALA:HA | 28 | 0.04 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:50:ARG:HA | 28 | 0.04 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:50:ARG:HA | 28 | 0.04 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:50:ARG:HA | 28 | 0.04 |
| (1,373) | 1:A:19:ILE:HB | 1:A:19:ILE:H | 12 | 0.04 |
| (1,373) | 1:A:19:ILE:HB | 1:A:19:ILE:H | 17 | 0.04 |
| (1,373) | 1:A:19:ILE:HB | 1:A:19:ILE:H | 29 | 0.04 |
| (1,316) | 1:A:40:MET:HB2 | 1:A:39:LEU:HD21 | 6 | 0.04 |
| (1,316) | 1:A:40:MET:HB2 | 1:A:39:LEU:HD22 | 6 | 0.04 |
| (1,316) | 1:A:40:MET:HB2 | 1:A:39:LEU:HD23 | 6 | 0.04 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 7 | 0.04 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 7 | 0.04 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 7 | 0.04 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 10 | 0.04 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 10 | 0.04 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 10 | 0.04 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 14 | 0.04 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 14 | 0.04 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 14 | 0.04 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 15 | 0.04 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 15 | 0.04 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 15 | 0.04 |
| (1,306) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:38:SER:H | 11 | 0.04 |
| (1,297) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:16:ILE:HA | 1 | 0.04 |
| (1,297) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:16:ILE:HA | 1 | 0.04 |
| (1,297) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:16:ILE:HA | 1 | 0.04 |
| (1,297) | 1:A:17:LEU:HD21 | 1:A:16:ILE:HA | 1 | 0.04 |
| (1,297) | 1:A:17:LEU:HD22 | 1:A:16:ILE:HA | 1 | 0.04 |
| (1,297) | 1:A:17:LEU:HD23 | 1:A:16:ILE:HA | 1 | 0.04 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 10 | 0.04 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 10 | 0.04 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 10 | 0.04 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 25 | 0.04 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 25 | 0.04 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 25 | 0.04 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 26 | 0.04 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 26 | 0.04 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 26 | 0.04 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:62:ARG:HG3 | 26 | 0.04 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:62:ARG:HG3 | 26 | 0.04 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:62:ARG:HG3 | 26 | 0.04 |
| (1,236) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:66:LEU:H | 14 | 0.04 |
| (1,236) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:66:LEU:H | 14 | 0.04 |
| (1,236) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:66:LEU:H | 14 | 0.04 |
| (1,229) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD21 | 24 | 0.04 |



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

| (1,229) 1:A:31:LEU:HA 1:A:36:LEU:HD22 24 0.04 (1,229) 1:A:31:LEU:HA 1:A:36:LEU:HD23 24 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 4 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 10 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 17 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,213) 1:A:430:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 29 0.04 (1,192) 1:A:429:SER:HB3 1:A:374:SER:H | Key | $\frac{1 \text{ from previous page.}}{\text{Atom-1}}$ | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---|----------|---|-----------------|-------|---------------|
| (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 4 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 10 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 15 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 17 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 24 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 29 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 10 0.04 (1,18) 1:A:77:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H <t< td=""><td>(1,229)</td><td>1:A:31:LEU:HA</td><td>1:A:36:LEU:HD22</td><td>24</td><td>0.04</td></t<> | (1,229) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD22 | 24 | 0.04 |
| (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 10 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 15 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 17 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 24 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 29 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 17 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 | (1,229) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD23 | 24 | 0.04 |
| (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 15 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 17 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 24 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 29 0.04 (1,192) 1:A:21:GLU:HA 1:A:74:SER:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:24:GEU:H 17 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GEU:H 17 </td <td>(1,213)</td> <td>1:A:30:SER:HB3</td> <td>1:A:33:ASP:HA</td> <td>4</td> <td>0.04</td> | (1,213) | 1:A:30:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HA | 4 | 0.04 |
| (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 17 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 24 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 29 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,17) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 <td< td=""><td>(1,213)</td><td>1:A:30:SER:HB3</td><td>1:A:33:ASP:HA</td><td>10</td><td>0.04</td></td<> | (1,213) | 1:A:30:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HA | 10 | 0.04 |
| (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 24 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 29 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 2 | (1,213) | 1:A:30:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HA | 15 | 0.04 |
| (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 24 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 29 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 | (1,213) | 1:A:30:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HA | 17 | 0.04 |
| (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 29 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,17) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 8 | (1,213) | 1:A:30:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HA | 20 | 0.04 |
| (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 29 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,17) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 8 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1 | (1,213) | 1:A:30:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HA | 24 | 0.04 |
| (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 29 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 17 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,17) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 8 0.04 (1,1730) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1 < | (1,192) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD21 | 29 | 0.04 |
| (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 17 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 8 0.04 (1,1730) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 3 | (1,192) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD22 | 29 | 0.04 |
| (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 17 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:64:LEU:H 1 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 3 0.04 | (1,192) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD23 | 29 | 0.04 |
| (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 17 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 8 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 3 0.04 | (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:74:SER:H | 10 | 0.04 |
| (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 8 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 3 0.04 | (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:69:LEU:H | 10 | 0.04 |
| (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 8 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 3 0.04 | (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:74:SER:H | 17 | 0.04 |
| (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 8 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 3 0.04 | · · / | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:69:LEU:H | 17 | 0.04 |
| (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 8 0.04 (1,1730) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 3 0.04 | · · / | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 1 | 0.04 |
| (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 8 0.04 (1,1730) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 3 0.04 | ` ' / | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 1 | 0.04 |
| (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 8 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 3 0.04 | (' / | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 1 | 0.04 |
| (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 8 0.04 (1,1730) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 3 0.04 | (, , | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 26 | 0.04 |
| (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 8 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 3 0.04 | · · / | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 26 | 0.04 |
| (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 8 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 3 0.04 | · / | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 26 | 0.04 |
| (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 8 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 3 0.04 | (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG21 | 8 | 0.04 |
| (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 3 0.04 | | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG22 | 8 | 0.04 |
| (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 3 0.04 | (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG23 | 8 | 0.04 |
| | (1,1710) | 1:A:63:GLN:H | 1:A:64:LEU:H | 1 | 0.04 |
| (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 6 0.04 | (1,1710) | 1:A:63:GLN:H | 1:A:64:LEU:H | 3 | 0.04 |
| | (1,1710) | 1:A:63:GLN:H | 1:A:64:LEU:H | 6 | 0.04 |
| (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 9 0.04 | (1,1710) | 1:A:63:GLN:H | 1:A:64:LEU:H | 9 | 0.04 |
| (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 13 0.04 | (1,1710) | 1:A:63:GLN:H | 1:A:64:LEU:H | 13 | 0.04 |
| (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 16 0.04 | (1,1710) | 1:A:63:GLN:H | 1:A:64:LEU:H | 16 | 0.04 |
| (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 19 0.04 | (1,1710) | 1:A:63:GLN:H | 1:A:64:LEU:H | 19 | 0.04 |
| (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 27 0.04 | (1,1710) | 1:A:63:GLN:H | 1:A:64:LEU:H | 27 | 0.04 |
| (1,171) 1:A:22:LEU:HG 1:A:21:ASP:HA 17 0.04 | | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:21:ASP:HA | 17 | 0.04 |
| (1,171) 1:A:22:LEU:HG 1:A:21:ASP:HA 26 0.04 | | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:21:ASP:HA | 26 | 0.04 |
| (1,171) 1:A:22:LEU:HG 1:A:21:ASP:HA 30 0.04 | | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:21:ASP:HA | 30 | 0.04 |
| (1,1701) 1:A:47:ILE:H 1:A:48:LEU:H 22 0.04 | (, , | 1:A:47:ILE:H | 1:A:48:LEU:H | | |
| (1,1692) 1:A:33:ASP:H 1:A:36:LEU:H 18 0.04 | | 1:A:33:ASP:H | 1:A:36:LEU:H | 18 | 0.04 |
| (1,1628) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HD11 6 0.04 | · · / | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:9:LEU:HD11 | 6 | 0.04 |
| (1,1628) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HD12 6 0.04 | · · / | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:9:LEU:HD12 | 6 | 0.04 |
| (1,1628) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HD13 6 0.04 | · · / | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:9:LEU:HD13 | 6 | 0.04 |
| (1,1599) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:40:MET:HG2 16 0.04 | · · / | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:40:MET:HG2 | 16 | 0.04 |
| (1,1599) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:40:MET:HG2 16 0.04 | (' | | | | |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|-------|---------------|
| (1,1599) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:40:MET:HG2 | 16 | 0.04 |
| (1,1588) | 1:A:7:ARG:HG2 | 1:A:12:ALA:H | 15 | 0.04 |
| (1,1588) | 1:A:7:ARG:HG3 | 1:A:12:ALA:H | 15 | 0.04 |
| (1,1587) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:75:LYS:HE2 | 22 | 0.04 |
| (1,1587) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:75:LYS:HE3 | 22 | 0.04 |
| (1,1587) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:75:LYS:HE2 | 27 | 0.04 |
| (1,1587) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:75:LYS:HE3 | 27 | 0.04 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:65:THR:HA | 3 | 0.04 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:65:THR:HA | 3 | 0.04 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:65:THR:HA | 3 | 0.04 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:65:THR:HA | 6 | 0.04 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:65:THR:HA | 6 | 0.04 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:65:THR:HA | 6 | 0.04 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:65:THR:HA | 7 | 0.04 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:65:THR:HA | 7 | 0.04 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:65:THR:HA | 7 | 0.04 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:65:THR:HA | 9 | 0.04 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:65:THR:HA | 9 | 0.04 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:65:THR:HA | 9 | 0.04 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:65:THR:HA | 17 | 0.04 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:65:THR:HA | 17 | 0.04 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:65:THR:HA | 17 | 0.04 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:65:THR:HA | 20 | 0.04 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:65:THR:HA | 20 | 0.04 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:65:THR:HA | 20 | 0.04 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:65:THR:HA | 29 | 0.04 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:65:THR:HA | 29 | 0.04 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:65:THR:HA | 29 | 0.04 |
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:13:VAL:H | 19 | 0.04 |
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:13:VAL:H | 19 | 0.04 |
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:13:VAL:H | 19 | 0.04 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:26:ASN:H | 8 | 0.04 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:26:ASN:H | 8 | 0.04 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:26:ASN:H | 8 | 0.04 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:26:ASN:H | 25 | 0.04 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:26:ASN:H | 25 | 0.04 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:26:ASN:H | 25 | 0.04 |
| (1,1552) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:24:GLY:H | 8 | 0.04 |
| (1,1552) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:24:GLY:H | 8 | 0.04 |
| (1,1552) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:24:GLY:H | 8 | 0.04 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:40:MET:HA | 10 | 0.04 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:40:MET:HA | 10 | 0.04 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|---------------|-------|---------------|
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:40:MET:HA | 10 | 0.04 |
| | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:40:MET:HA | 17 | 0.04 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:40:MET:HA | 17 | 0.04 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:40:MET:HA | 17 | 0.04 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:40:MET:HA | 19 | 0.04 |
| | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:40:MET:HA | 19 | 0.04 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:40:MET:HA | 19 | 0.04 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:40:MET:HA | 25 | 0.04 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:40:MET:HA | 25 | 0.04 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:40:MET:HA | 25 | 0.04 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:42:VAL:HA | 8 | 0.04 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:42:VAL:HA | 8 | 0.04 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:42:VAL:HA | 8 | 0.04 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:42:VAL:HA | 25 | 0.04 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:42:VAL:HA | 25 | 0.04 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:42:VAL:HA | 25 | 0.04 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:45:ARG:HE | 2 | 0.04 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG22 | 1:A:45:ARG:HE | 2 | 0.04 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG23 | 1:A:45:ARG:HE | 2 | 0.04 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:45:ARG:HE | 4 | 0.04 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG22 | 1:A:45:ARG:HE | 4 | 0.04 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG23 | 1:A:45:ARG:HE | 4 | 0.04 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:45:ARG:HE | 25 | 0.04 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG22 | 1:A:45:ARG:HE | 25 | 0.04 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG23 | 1:A:45:ARG:HE | 25 | 0.04 |
| (1,1539) | 1:A:44:VAL:HB | 1:A:48:LEU:H | 18 | 0.04 |
| (1,1531) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:72:MET:H | 6 | 0.04 |
| (1,1531) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:72:MET:H | 6 | 0.04 |
| (1,1531) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:72:MET:H | 6 | 0.04 |
| (1,1531) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:72:MET:H | 24 | 0.04 |
| (1,1531) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:72:MET:H | 24 | 0.04 |
| (1,1531) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:72:MET:H | 24 | 0.04 |
| (1,1523) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:70:GLN:H | 18 | 0.04 |
| (1,1523) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:70:GLN:H | 25 | 0.04 |
| (1,1517) | 1:A:8:ASP:HB3 | 1:A:7:ARG:HA | 12 | 0.04 |
| (1,1503) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:49:GLU:H | 12 | 0.04 |
| (1,1503) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:49:GLU:H | 12 | 0.04 |
| (1,1503) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:49:GLU:H | 12 | 0.04 |
| (1,1498) | 1:A:67:ARG:HD2 | 1:A:69:LEU:H | 5 | 0.04 |
| (1,1498) | 1:A:67:ARG:HD2 | 1:A:69:LEU:H | 14 | 0.04 |
| (1,1498) | 1:A:67:ARG:HD2 | 1:A:69:LEU:H | 18 | 0.04 |
| (1,1498) | 1:A:67:ARG:HD2 | 1:A:69:LEU:H | 19 | 0.04 |



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

| Key Atom-1 Atom-2 Model Violation (A (1,1498) 1:A:67:ARG:HD2 1:A:69:LEU:H 20 0.04 (1,1498) 1:A:67:ARG:HD2 1:A:69:LEU:H 25 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 18 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 18 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 18 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 21 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 21 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 21 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1497) 1:A:66:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1491) 1:A:46:GLN:HG2 1:A:63 | (A) |
|--|-----|
| (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 18 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 18 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 18 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 21 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 21 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1491) 1:A:46:GLN:HG23 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1494) 1:A:46:GLN:HG2 1:A:50:ARG:HD3 26 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 | |
| (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 18 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 18 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 21 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 21 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 21 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1497) 1:A:46:GLN:HG23 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1494) 1:A:46:GLN:HG2 1:A:50:ARG:HD3 26 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG22 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 | |
| (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 18 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 21 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 21 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 21 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1491) 1:A:46:GLN:HG2 1:A:50:ARG:HD2 26 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG22 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 | |
| (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 21 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 21 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 21 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1494) 1:A:46:GLN:HG23 1:A:50:ARG:HD3 26 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG22 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 | |
| (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 21 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 21 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1494) 1:A:46:GLN:HG2 1:A:50:ARG:HD2 26 0.04 (1,1494) 1:A:46:GLN:HG2 1:A:50:ARG:HD3 26 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG22 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 | |
| (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 21 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1494) 1:A:46:GLN:HG2 1:A:50:ARG:HD2 26 0.04 (1,1494) 1:A:46:GLN:HG2 1:A:50:ARG:HD3 26 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG22 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 <td< td=""><td></td></td<> | |
| (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1494) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1494) 1:A:46:GLN:HG2 1:A:50:ARG:HD3 26 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG22 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 <t< td=""><td></td></t<> | |
| (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1494) 1:A:46:GLN:HG2 1:A:50:ARG:HD2 26 0.04 (1,1494) 1:A:46:GLN:HG2 1:A:50:ARG:HD3 26 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG22 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 | |
| (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 26 0.04 (1,1494) 1:A:46:GLN:HG2 1:A:50:ARG:HD2 26 0.04 (1,1494) 1:A:46:GLN:HG2 1:A:50:ARG:HD3 26 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG22 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1484) 1:A:41:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 | |
| (1,1494) 1:A:46:GLN:HG2 1:A:50:ARG:HD2 26 0.04 (1,1494) 1:A:46:GLN:HG2 1:A:50:ARG:HD3 26 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG22 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1 | |
| (1,1494) 1:A:46:GLN:HG2 1:A:50:ARG:HD3 26 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG22 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A: | |
| (1,1491) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG22 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 | |
| (1,1491) 1:A:42:VAL:HG22 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 | |
| (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 18 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 | |
| (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 | |
| (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 | |
| (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 5 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 | |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 | |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 | |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 | |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 | |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 | |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 | |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 1 0.04 | |
| | |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 1 0.04 | |
| | |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 1 0.04 | |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 11 0.04 | |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 11 0.04 | |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 11 0.04 | |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 11 0.04 | |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 11 0.04 | |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 11 0.04 | |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 11 0.04 | |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 11 0.04 | |
| (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 11 0.04 | |
| (1,1445) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:47:ILE:HG13 23 0.04 | |
| (1,1445) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:47:ILE:HG13 23 0.04 | |
| (1,1445) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:47:ILE:HG13 23 0.04 | |
| (1,1435) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:9:LEU:HA 13 0.04 | |
| (1,1435) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:9:LEU:HA 13 0.04 | |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1435) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:9:LEU:HA | 13 | 0.04 |
| (1,1429) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:39:LEU:H | 11 | 0.04 |
| (1,1429) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:39:LEU:H | 11 | 0.04 |
| (1,1429) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:39:LEU:H | 11 | 0.04 |
| (1,1423) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:39:LEU:HG | 14 | 0.04 |
| (1,1423) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:39:LEU:HG | 14 | 0.04 |
| (1,1423) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:39:LEU:HG | 14 | 0.04 |
| (1,1411) | 1:A:42:VAL:HG11 | 1:A:43:GLU:HG3 | 17 | 0.04 |
| (1,1411) | 1:A:42:VAL:HG12 | 1:A:43:GLU:HG3 | 17 | 0.04 |
| (1,1411) | 1:A:42:VAL:HG13 | 1:A:43:GLU:HG3 | 17 | 0.04 |
| (1,1407) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:44:VAL:H | 1 | 0.04 |
| (1,1407) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:44:VAL:H | 5 | 0.04 |
| (1,1407) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:44:VAL:H | 16 | 0.04 |
| (1,1402) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:ARG:HB3 | 1 | 0.04 |
| (1,1402) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:ARG:HB3 | 4 | 0.04 |
| (1,1402) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:ARG:HB3 | 5 | 0.04 |
| (1,1402) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:ARG:HB3 | 6 | 0.04 |
| (1,1402) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:ARG:HB3 | 14 | 0.04 |
| (1,1402) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:ARG:HB3 | 20 | 0.04 |
| (1,1402) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:ARG:HB3 | 25 | 0.04 |
| (1,1402) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:ARG:HB3 | 27 | 0.04 |
| (1,1402) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:ARG:HB3 | 29 | 0.04 |
| (1,1378) | 1:A:12:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HA | 8 | 0.04 |
| (1,1378) | 1:A:12:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HA | 8 | 0.04 |
| (1,1378) | 1:A:12:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HA | 8 | 0.04 |
| (1,1367) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:68:LYS:HG2 | 13 | 0.04 |
| (1,1367) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:68:LYS:HG3 | 13 | 0.04 |
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:69:LEU:H | 30 | 0.04 |
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:69:LEU:H | 30 | 0.04 |
| (1,1331) | 1:A:68:LYS:HG2 | 1:A:64:LEU:HD21 | 2 | 0.04 |
| (1,1331) | 1:A:68:LYS:HG2 | 1:A:64:LEU:HD22 | 2 | 0.04 |
| (1,1331) | 1:A:68:LYS:HG2 | 1:A:64:LEU:HD23 | 2 | 0.04 |
| (1,1331) | 1:A:68:LYS:HG3 | 1:A:64:LEU:HD21 | 2 | 0.04 |
| (1,1331) | 1:A:68:LYS:HG3 | 1:A:64:LEU:HD22 | 2 | 0.04 |
| (1,1331) | 1:A:68:LYS:HG3 | 1:A:64:LEU:HD23 | 2 | 0.04 |
| (1,1296) | 1:A:63:GLN:HA | 1:A:32:ALA:HB1 | 3 | 0.04 |
| (1,1296) | 1:A:63:GLN:HA | 1:A:32:ALA:HB2 | 3 | 0.04 |
| (1,1296) | 1:A:63:GLN:HA | 1:A:32:ALA:HB3 | 3 | 0.04 |
| (1,1252) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:63:GLN:HE22 | 2 | 0.04 |
| (1,1252) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:63:GLN:HE22 | 5 | 0.04 |
| (1,1252) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:63:GLN:HE22 | 7 | 0.04 |
| (1,1252) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:63:GLN:HE22 | 9 | 0.04 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1252) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:63:GLN:HE22 | 24 | 0.04 |
| (1,1239) | 1:A:60:GLU:HB3 | 1:A:56:LEU:HB2 | 9 | 0.04 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:57:PRO:HB3 | 17 | 0.04 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:57:PRO:HB3 | 17 | 0.04 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:57:PRO:HB3 | 17 | 0.04 |
| (1,1184) | 1:A:56:LEU:HB3 | 1:A:57:PRO:HG3 | 14 | 0.04 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HB2 | 2 | 0.04 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HG2 | 2 | 0.04 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HB2 | 6 | 0.04 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HG2 | 6 | 0.04 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HB2 | 12 | 0.04 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HG2 | 12 | 0.04 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HB2 | 15 | 0.04 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HG2 | 15 | 0.04 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HB2 | 24 | 0.04 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HG2 | 24 | 0.04 |
| (1,1172) | 1:A:55:VAL:HA | 1:A:57:PRO:HG3 | 3 | 0.04 |
| (1,1172) | 1:A:55:VAL:HA | 1:A:57:PRO:HG3 | 4 | 0.04 |
| (1,1172) | 1:A:55:VAL:HA | 1:A:57:PRO:HG3 | 9 | 0.04 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:51:GLU:HB2 | 10 | 0.04 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:51:GLU:HB2 | 10 | 0.04 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:51:GLU:HB2 | 10 | 0.04 |
| (1,1147) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:48:LEU:HB3 | 17 | 0.04 |
| (1,1147) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:48:LEU:HB3 | 23 | 0.04 |
| (1,1147) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:48:LEU:HB3 | 30 | 0.04 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD21 | 1:A:42:VAL:H | 6 | 0.04 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD22 | 1:A:42:VAL:H | 6 | 0.04 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD23 | 1:A:42:VAL:H | 6 | 0.04 |
| (1,1086) | 1:A:39:LEU:HB2 | 1:A:41:GLY:H | 16 | 0.04 |
| (1,1061) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:38:SER:H | 20 | 0.04 |
| (1,1061) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:38:SER:H | 20 | 0.04 |
| (1,1061) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:38:SER:H | 20 | 0.04 |
| (1,1056) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:62:ARG:HA | 18 | 0.04 |
| (1,1056) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:62:ARG:HA | 18 | 0.04 |
| (1,1056) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:62:ARG:HA | 18 | 0.04 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG21 | 7 | 0.04 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG22 | 7 | 0.04 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG23 | 7 | 0.04 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG21 | 7 | 0.04 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG22 | 7 | 0.04 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG23 | 7 | 0.04 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG21 | 7 | 0.04 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG22 | 7 | 0.04 |
| . , | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG23 | 7 | 0.04 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG21 | 30 | 0.04 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG22 | 30 | 0.04 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG23 | 30 | 0.04 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG21 | 30 | 0.04 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG22 | 30 | 0.04 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG23 | 30 | 0.04 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG21 | 30 | 0.04 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG22 | 30 | 0.04 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG23 | 30 | 0.04 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:H | 1 | 0.04 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:H | 1 | 0.04 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:H | 1 | 0.04 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:31:LEU:HA | 7 | 0.04 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:31:LEU:HA | 7 | 0.04 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:31:LEU:HA | 7 | 0.04 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:31:LEU:HA | 24 | 0.04 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:31:LEU:HA | 24 | 0.04 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:31:LEU:HA | 24 | 0.04 |
| (1,1016) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:29:SER:H | 7 | 0.04 |
| (1,1016) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:29:SER:H | 7 | 0.04 |
| (1,1016) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:29:SER:H | 7 | 0.04 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:31:LEU:HA | 2 | 0.04 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:31:LEU:HA | 2 | 0.04 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:31:LEU:HA | 2 | 0.04 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:31:LEU:HA | 21 | 0.04 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:31:LEU:HA | 21 | 0.04 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:31:LEU:HA | 21 | 0.04 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:70:GLN:HE21 | 4 | 0.03 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:70:GLN:HE21 | 4 | 0.03 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:70:GLN:HE21 | 4 | 0.03 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:70:GLN:HE21 | 26 | 0.03 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:70:GLN:HE21 | 26 | 0.03 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:70:GLN:HE21 | 26 | 0.03 |
| (1,971) | 1:A:27:LEU:HD11 | 1:A:25:ILE:H | 12 | 0.03 |
| (1,971) | 1:A:27:LEU:HD12 | 1:A:25:ILE:H | 12 | 0.03 |
| (1,971) | 1:A:27:LEU:HD13 | 1:A:25:ILE:H | 12 | 0.03 |
| (1,97) | 1:A:52:HIS:HB2 | 1:A:54:LEU:HB3 | 26 | 0.03 |
| (1,968) | 1:A:27:LEU:HD11 | 1:A:67:ARG:HA | 15 | 0.03 |
| (1,968) | 1:A:27:LEU:HD12 | 1:A:67:ARG:HA | 15 | 0.03 |
| (1,968) | 1:A:27:LEU:HD13 | 1:A:67:ARG:HA | 15 | 0.03 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:9:LEU:HD11 | 14 | 0.03 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:9:LEU:HD12 | 14 | 0.03 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:9:LEU:HD13 | 14 | 0.03 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:9:LEU:HD11 | 14 | 0.03 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:9:LEU:HD12 | 14 | 0.03 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:9:LEU:HD13 | 14 | 0.03 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:9:LEU:HD11 | 14 | 0.03 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:9:LEU:HD12 | 14 | 0.03 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:9:LEU:HD13 | 14 | 0.03 |
| (1,880) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:10:VAL:H | 4 | 0.03 |
| (1,880) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:10:VAL:H | 4 | 0.03 |
| (1,880) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:10:VAL:H | 4 | 0.03 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:68:LYS:HB2 | 6 | 0.03 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:68:LYS:HB3 | 6 | 0.03 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:68:LYS:HB2 | 6 | 0.03 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:68:LYS:HB3 | 6 | 0.03 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:68:LYS:HB2 | 6 | 0.03 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:68:LYS:HB3 | 6 | 0.03 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:68:LYS:HB2 | 16 | 0.03 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:68:LYS:HB3 | 16 | 0.03 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:68:LYS:HB2 | 16 | 0.03 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:68:LYS:HB3 | 16 | 0.03 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:68:LYS:HB2 | 16 | 0.03 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:68:LYS:HB3 | 16 | 0.03 |
| (1,847) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HD2 | 1 | 0.03 |
| (1,847) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HD3 | 1 | 0.03 |
| (1,847) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HD2 | 23 | 0.03 |
| (1,847) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HD3 | 23 | 0.03 |
| (1,846) | 1:A:8:ASP:HB3 | 1:A:11:LYS:HD2 | 22 | 0.03 |
| (1,846) | 1:A:8:ASP:HB3 | 1:A:11:LYS:HD3 | 22 | 0.03 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD11 | 27 | 0.03 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD12 | 27 | 0.03 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD13 | 27 | 0.03 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD21 | 27 | 0.03 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD22 | 27 | 0.03 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:69:LEU:HD23 | 27 | 0.03 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 27 | 0.03 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 27 | 0.03 |
| (1,83) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 27 | 0.03 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:9:LEU:HB3 | 10 | 0.03 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG2 | 10 | 0.03 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG3 | 10 | 0.03 |



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

| (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9-LEU:HB3 26 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 26 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 20 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 3 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,744) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,744) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,744) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,744) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:70:CLN:HB 20 | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|--|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HG2 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 20 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 3 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,744) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,744) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,744) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,744) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 13 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 13 0.03 (1,740) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB3 23 0.03 (1,740) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB3 26 0.03 (1,740) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB3 26 0.03 (1,740) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB | (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:9:LEU:HB3 | 26 | 0.03 |
| (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HG23 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HG23 1:A:31:LEU:H | (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG2 | 26 | 0.03 |
| (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA <td>(1,82)</td> <td>1:A:73:SER:HB2</td> <td>1:A:7:ARG:HG3</td> <td>26</td> <td>0.03</td> | (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG3 | 26 | 0.03 |
| (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA <td>(1,813)</td> <td>1:A:65:THR:HG21</td> <td>1:A:69:LEU:H</td> <td>26</td> <td>0.03</td> | (1,813) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:69:LEU:H | 26 | 0.03 |
| (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 20 0.03 (1,753) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:72:MET:H 3 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,744) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,744) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HB 1:A:70:GL | (1,813) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:69:LEU:H | 26 | 0.03 |
| (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 20 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:72:MET:H 3 0.03 (1,753) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,740) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,740) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,740) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,740) 1:A | (1,813) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:69:LEU:H | 26 | 0.03 |
| (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 20 0.03 (1,753) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:72:MET:H 3 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG21 13 0.03 (1,740) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 9 0.03 (1,740) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:A | (1,808) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:30:SER:HA | 10 | 0.03 |
| (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 20 0.03 (1,701) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 20 0.03 (1,733) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:72:MET:H 3 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,744) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HB 1:A:10:VAL:HG21 13 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG21 13 0.03 (1,740) 1:A:63:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 13 0.03 (1,740) 1:A:63:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 13 0.03 (1,740) 1:A:63:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 13 0.03 (1,740) 1:A:63:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 13 0.03 (1,740) 1:A:63:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG21 13 0.03 (1,740) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 9 0.03 (1,740) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 9 0.03 (1,740) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,700) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,700) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:79:MET:H 2 0.03 (1,700) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:79:MET:H 2 0.03 (1,700) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:79:MET:H 2 0.03 (1,700) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:79:MET:H 2 0.03 | (1,808) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:30:SER:HA | 10 | 0.03 |
| (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:72:MET:H 3 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H | (1,808) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:30:SER:HA | 10 | 0.03 |
| (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 20 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:72:MET:H 3 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H | (1,808) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:30:SER:HA | 27 | 0.03 |
| (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 20 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:72:MET:H 3 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H <t< td=""><td>(1,808)</td><td>1:A:65:THR:HG22</td><td>1:A:30:SER:HA</td><td>27</td><td>0.03</td></t<> | (1,808) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:30:SER:HA | 27 | 0.03 |
| (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:72:MET:H 3 0.03 (1,753) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:72:MET:H 3 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 | (1,808) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:30:SER:HA | 27 | 0.03 |
| (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 20 0.03 (1,753) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:72:MET:H 3 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG21 13 | (1,808) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:30:SER:HA | 28 | 0.03 |
| (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:3:1:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:3:1:LEU:HD12 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:3:1:LEU:HD13 20 0.03 (1,753) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:72:MET:H 3 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG21 13 0.03 (1,740) 1:A:63:GLN:HA 1:A:60:GLU:HA 9 | (1,808) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:30:SER:HA | 28 | 0.03 |
| (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:3:31:LEU:HD12 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 20 0.03 (1,753) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:72:MET:H 3 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG21 13 0.03 (1,740) 1:A:63:GLN:HA 1:A:60:GLU:HA 9 | (1,808) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:30:SER:HA | 28 | 0.03 |
| (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 20 0.03 (1,753) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:72:MET:H 3 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG21 13 0.03 (1,740) 1:A:63:GLN:HA 1:A:60:GLU:HA 9 0.03 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 9 | (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD11 | 20 | 0.03 |
| (1,753) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:72:MET:H 3 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,744) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:10:VAL:HG21 13 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 13 | (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD12 | 20 | 0.03 |
| (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:10:VAL:HG21 13 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HB4 1:A:10:VAL:HG22 13 0.03 (1,740) 1:A:76:GLN:HB4 1:A:10:VAL:HG23 13 | (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD13 | 20 | 0.03 |
| (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG21 13 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 13 0.03 (1,740) 1:A:63:GLN:HA 1:A:60:GLU:HA 9 0.03 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 9 0.03 (1,710) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB3 23 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 19 | (1,753) | 1:A:70:GLN:HG2 | 1:A:72:MET:H | 3 | 0.03 |
| (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:10:VAL:HG21 13 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 13 0.03 (1,740) 1:A:63:GLN:HA 1:A:60:GLU:HA 9 0.03 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 27 0.03 (1,710) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB3 23 0.03 (1,710) 1:A:63:GLN:HA 1:A:59:ARG:H 19 | (1,743) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:72:MET:H | 2 | 0.03 |
| (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG21 13 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 13 0.03 (1,740) 1:A:63:GLN:HA 1:A:60:GLU:HA 9 0.03 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 9 0.03 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 27 0.03 (1,710) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB3 23 0.03 (1,710) 1:A:63:GLN:HA 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 19 | (1,743) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:72:MET:H | 2 | 0.03 |
| (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG21 13 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 13 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 13 0.03 (1,740) 1:A:63:GLN:HA 1:A:60:GLU:HA 9 0.03 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 27 0.03 (1,710) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 27 0.03 (1,710) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB3 23 0.03 (1,700) 1:A:63:GLN:HA 1:A:59:ARG:HB3 26 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 24 <td>(1,743)</td> <td>1:A:70:GLN:HB2</td> <td>1:A:72:MET:H</td> <td>5</td> <td>0.03</td> | (1,743) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:72:MET:H | 5 | 0.03 |
| (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG21 13 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 13 0.03 (1,740) 1:A:63:GLN:HA 1:A:60:GLU:HA 9 0.03 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 27 0.03 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 27 0.03 (1,710) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB3 23 0.03 (1,710) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB3 26 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 24 0.03 (1,700) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 2 | (1,743) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:72:MET:H | 5 | 0.03 |
| (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG21 13 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 13 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 13 0.03 (1,740) 1:A:63:GLN:HA 1:A:60:GLU:HA 9 0.03 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 27 0.03 (1,710) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB3 23 0.03 (1,710) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB3 26 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 24 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,700) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 2 <td>(1,743)</td> <td>1:A:70:GLN:HB2</td> <td>1:A:72:MET:H</td> <td>9</td> <td>0.03</td> | (1,743) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:72:MET:H | 9 | 0.03 |
| (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG21 13 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 13 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 13 0.03 (1,740) 1:A:63:GLN:HA 1:A:60:GLU:HA 9 0.03 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 27 0.03 (1,710) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB3 23 0.03 (1,710) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB3 26 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 24 0.03 (1,700) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,700) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,700) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 2 | (1,743) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:72:MET:H | 9 | 0.03 |
| (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG21 13 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 13 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 13 0.03 (1,740) 1:A:63:GLN:HA 1:A:60:GLU:HA 9 0.03 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 27 0.03 (1,710) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB3 23 0.03 (1,710) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB3 26 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 24 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 24 0.03 (1,700) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 2 | (1,743) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:72:MET:H | 26 | 0.03 |
| (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 13 0.03 (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 13 0.03 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 9 0.03 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 27 0.03 (1,710) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB3 23 0.03 (1,710) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB3 26 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 24 0.03 (1,700) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 2 0.03 | (1,743) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:72:MET:H | 26 | 0.03 |
| (1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 13 0.03 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 9 0.03 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 27 0.03 (1,710) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB3 23 0.03 (1,710) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB3 26 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 24 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 24 0.03 (1,700) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 2 0.03 | (1,740) | 1:A:70:GLN:HA | 1:A:10:VAL:HG21 | 13 | 0.03 |
| (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 9 0.03 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 27 0.03 (1,710) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB3 23 0.03 (1,710) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB3 26 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 24 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 24 0.03 (1,700) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 2 0.03 | (1,740) | 1:A:70:GLN:HA | 1:A:10:VAL:HG22 | 13 | 0.03 |
| (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 27 0.03 (1,710) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB3 23 0.03 (1,710) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB3 26 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 24 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 24 0.03 (1,706) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 2 0.03 | (1,740) | 1:A:70:GLN:HA | 1:A:10:VAL:HG23 | 13 | 0.03 |
| (1,710) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB3 23 0.03 (1,710) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB3 26 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 24 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 24 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 2 0.03 | (1,732) | 1:A:63:GLN:HG3 | 1:A:60:GLU:HA | 9 | 0.03 |
| (1,710) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB3 26 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 24 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 24 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 2 0.03 | | 1:A:63:GLN:HG3 | 1:A:60:GLU:HA | 27 | 0.03 |
| (1,710) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB3 26 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 24 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 24 0.03 (1,700) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 2 0.03 | · · / | 1:A:63:GLN:HA | 1:A:30:SER:HB3 | 23 | 0.03 |
| (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 24 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 24 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 2 0.03 | · · / | 1:A:63:GLN:HA | 1:A:30:SER:HB3 | 26 | 0.03 |
| (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 19 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 24 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 24 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 2 0.03 | | 1:A:59:ARG:HD2 | 1:A:59:ARG:H | 19 | 0.03 |
| (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 24 0.03 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 24 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 2 0.03 | , , | 1:A:59:ARG:HD3 | 1:A:59:ARG:H | 19 | |
| (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 24 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 2 0.03 | · · / | 1:A:59:ARG:HD2 | 1:A:59:ARG:H | 24 | 0.03 |
| (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 2 0.03 | | 1:A:59:ARG:HD3 | 1:A:59:ARG:H | 24 | 0.03 |
| (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 2 0.03 | · · / | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:72:MET:H | 2 | 0.03 |
| (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 2 0.03 | | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:72:MET:H | 2 | 0.03 |
| | · · / | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:72:MET:H | 2 | 0.03 |
| (1,10) $1.A.9.$ DEU.IID21 $1.A.71.$ GLU.II Z 0.05 | (1,70) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:71:GLU:H | 2 | 0.03 |



Continued from previous page...

| (1,70) | | | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:71:GLU:H | 2 | 0.03 |
| (1,70) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:71:GLU:H | 2 | 0.03 |
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD21 | 2 | 0.03 |
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD22 | 2 | 0.03 |
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD23 | 2 | 0.03 |
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD21 | 4 | 0.03 |
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD22 | 4 | 0.03 |
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD23 | 4 | 0.03 |
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD21 | 20 | 0.03 |
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD22 | 20 | 0.03 |
| (1,673) | 1:A:43:GLU:HA | 1:A:39:LEU:HD23 | 20 | 0.03 |
| (1,662) | 1:A:49:GLU:HA | 1:A:46:GLN:HA | 16 | 0.03 |
| (1,662) | 1:A:49:GLU:HA | 1:A:46:GLN:HA | 24 | 0.03 |
| (1,607) | 1:A:67:ARG:HA | 1:A:67:ARG:HD3 | 2 | 0.03 |
| (1,607) | 1:A:67:ARG:HA | 1:A:67:ARG:HD3 | 5 | 0.03 |
| (1,599) | 1:A:66:LEU:HA | 1:A:69:LEU:H | 13 | 0.03 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:66:LEU:HA | 7 | 0.03 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:66:LEU:HA | 7 | 0.03 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:66:LEU:HA | 7 | 0.03 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:66:LEU:HA | 24 | 0.03 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:66:LEU:HA | 24 | 0.03 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:66:LEU:HA | 24 | 0.03 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:66:LEU:HA | 26 | 0.03 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:66:LEU:HA | 26 | 0.03 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:66:LEU:HA | 26 | 0.03 |
| (1,58) | 1:A:66:LEU:HD21 | 1:A:10:VAL:HB | 28 | 0.03 |
| (1,58) | 1:A:66:LEU:HD22 | 1:A:10:VAL:HB | 28 | 0.03 |
| (1,58) | 1:A:66:LEU:HD23 | 1:A:10:VAL:HB | 28 | 0.03 |
| (1,58) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:43:GLU:HB2 | 28 | 0.03 |
| (1,58) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:43:GLU:HB2 | 28 | 0.03 |
| (1,58) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:43:GLU:HB2 | 28 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB1 | 12 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB2 | 12 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB3 | 12 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB1 | 12 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB2 | 12 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB3 | 12 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB1 | 12 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB2 | 12 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB3 | 12 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB1 | 14 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB2 | 14 | 0.03 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|-------|---------------|
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB3 | 14 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB1 | 14 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB2 | 14 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB3 | 14 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB1 | 14 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB2 | 14 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB3 | 14 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB1 | 21 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB2 | 21 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB3 | 21 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB1 | 21 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB2 | 21 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB3 | 21 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB1 | 21 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB2 | 21 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB3 | 21 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB1 | 25 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB2 | 25 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB3 | 25 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB1 | 25 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB2 | 25 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB3 | 25 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB1 | 25 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB2 | 25 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB3 | 25 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB1 | 26 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB2 | 26 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB3 | 26 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB1 | 26 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB2 | 26 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB3 | 26 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB1 | 26 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB2 | 26 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB3 | 26 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB1 | 27 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB2 | 27 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB3 | 27 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB1 | 27 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB2 | 27 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB3 | 27 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB1 | 27 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB2 | 27 | 0.03 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB3 | 27 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB1 | 30 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB2 | 30 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB3 | 30 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB1 | 30 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB2 | 30 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB3 | 30 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB1 | 30 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB2 | 30 | 0.03 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB3 | 30 | 0.03 |
| (1,533) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:25:ILE:HA | 22 | 0.03 |
| (1,533) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:25:ILE:HA | 22 | 0.03 |
| (1,533) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:25:ILE:HA | 22 | 0.03 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD11 | 4 | 0.03 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD12 | 4 | 0.03 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD13 | 4 | 0.03 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD11 | 1:A:43:GLU:HG2 | 9 | 0.03 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD12 | 1:A:43:GLU:HG2 | 9 | 0.03 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD13 | 1:A:43:GLU:HG2 | 9 | 0.03 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD11 | 1:A:43:GLU:HG2 | 29 | 0.03 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD12 | 1:A:43:GLU:HG2 | 29 | 0.03 |
| (1,499) | 1:A:47:ILE:HD13 | 1:A:43:GLU:HG2 | 29 | 0.03 |
| (1,491) | 1:A:27:LEU:HA | 1:A:66:LEU:H | 5 | 0.03 |
| (1,491) | 1:A:27:LEU:HA | 1:A:66:LEU:H | 8 | 0.03 |
| (1,491) | 1:A:27:LEU:HA | 1:A:66:LEU:H | 24 | 0.03 |
| (1,479) | 1:A:23:ALA:HA | 1:A:21:ASP:HA | 5 | 0.03 |
| (1,479) | 1:A:23:ALA:HA | 1:A:21:ASP:HA | 20 | 0.03 |
| (1,479) | 1:A:23:ALA:HA | 1:A:21:ASP:HA | 23 | 0.03 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD11 | 14 | 0.03 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD12 | 14 | 0.03 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD13 | 14 | 0.03 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD11 | 20 | 0.03 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD12 | 20 | 0.03 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD13 | 20 | 0.03 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD11 | 27 | 0.03 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD12 | 27 | 0.03 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD13 | 27 | 0.03 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD11 | 29 | 0.03 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD12 | 29 | 0.03 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD13 | 29 | 0.03 |
| (1,456) | 1:A:47:ILE:HB | 1:A:50:ARG:H | 2 | 0.03 |
| (1,456) | 1:A:47:ILE:HB | 1:A:50:ARG:H | 11 | 0.03 |



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

| (1,45) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:11:LYS:HE3 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:11:LYS:HE2 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:11:LYS:HE3 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:11:LYS:HE2 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:11:LYS:HE3 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:68:LYS:HE2 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:68:LYS:HE3 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:68:LYS:HE2 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:68:LYS:HE3 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:68:LYS:HE2 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:68:LYS:HE3 29 0. | 03 03 03 03 03 03 03 03 03 03 |
|---|--|
| (1,45) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:11:LYS:HE2 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:11:LYS:HE3 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:11:LYS:HE2 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:11:LYS:HE3 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:68:LYS:HE2 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:68:LYS:HE3 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:68:LYS:HE2 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:68:LYS:HE3 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:68:LYS:HE2 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:68:LYS:HE3 29 0. | 03 03 03 03 03 03 03 03 03 03 |
| (1,45) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:11:LYS:HE3 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:11:LYS:HE2 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:11:LYS:HE3 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:68:LYS:HE2 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:68:LYS:HE3 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:68:LYS:HE2 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:68:LYS:HE3 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:68:LYS:HE2 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:68:LYS:HE3 29 0. | 03 03 03 03 03 03 03 03 03 |
| (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:11:LYS:HE2 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:11:LYS:HE3 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:68:LYS:HE2 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:68:LYS:HE3 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:68:LYS:HE2 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:68:LYS:HE3 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:68:LYS:HE2 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:68:LYS:HE3 29 0. | 03 03 03 03 03 03 03 03 |
| (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:11:LYS:HE3 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:68:LYS:HE2 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:68:LYS:HE3 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:68:LYS:HE2 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:68:LYS:HE3 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:68:LYS:HE2 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:68:LYS:HE3 29 0. | 03 03 03 03 03 03 03 |
| (1,45) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:68:LYS:HE2 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:68:LYS:HE3 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:68:LYS:HE2 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:68:LYS:HE3 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:68:LYS:HE2 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:68:LYS:HE3 29 0. | 03 03 03 03 03 03 |
| (1,45) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:68:LYS:HE3 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:68:LYS:HE2 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:68:LYS:HE3 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:68:LYS:HE2 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:68:LYS:HE3 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:68:LYS:HE3 29 0. | 03 03 03 03 03 |
| (1,45) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:68:LYS:HE2 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:68:LYS:HE3 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:68:LYS:HE2 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:68:LYS:HE3 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:68:LYS:HE3 29 0. | 03 03 03 03 |
| (1,45) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:68:LYS:HE3 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:68:LYS:HE2 29 0. (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:68:LYS:HE3 29 0. | 03 03 03 |
| (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:68:LYS:HE2 29 0.0 (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:68:LYS:HE3 29 0.0 | 03 |
| (1,45) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:68:LYS:HE3 29 0. | .03 |
| | |
| (4.40) 4.40 1741 17004 6.4 67 7777 77 | 03 |
| (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:17:LEU:H 26 0. | |
| (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:17:LEU:H 26 0. | .03 |
| (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 26 0. | .03 |
| (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:73:SER:H 26 0. | .03 |
| (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:73:SER:H 26 0. | .03 |
| (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:73:SER:H 26 0. | .03 |
| (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:18:GLY:H 26 0. | .03 |
| (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:18:GLY:H 26 0. | .03 |
| (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GLY:H 26 0. | .03 |
| (1,417) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:61:VAL:HG11 30 0. | .03 |
| (1,417) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:61:VAL:HG12 30 0. | .03 |
| (1,417) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:61:VAL:HG13 30 0. | .03 |
| (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG11 30 0. | .03 |
| (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG12 30 0. | .03 |
| (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG13 30 0. | .03 |
| (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 1 0. | .03 |
| (1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 1 0. | .03 |
| (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 1 0. | .03 |
| (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 6 0. | .03 |
| (1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 6 0. | .03 |
| (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 6 0. | .03 |
| (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 11 0. | .03 |
| (1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 11 0. | .03 |
| (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 11 0. | .03 |
| (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 28 0. | .03 |
| (1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 28 0. | .03 |
| (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 28 0. | .03 |
| (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 2 0. | .03 |
| (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 2 0. | .03 |
| | .03 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|----------------|
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:50:ARG:HA | 2 | 0.03 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:50:ARG:HA | 2 | 0.03 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:50:ARG:HA | 2 | 0.03 |
| (1,373) | 1:A:19:ILE:HB | 1:A:19:ILE:H | 4 | 0.03 |
| (1,373) | 1:A:19:ILE:HB | 1:A:19:ILE:H | 5 | 0.03 |
| (1,373) | 1:A:19:ILE:HB | 1:A:19:ILE:H | 11 | 0.03 |
| (1,373) | 1:A:19:ILE:HB | 1:A:19:ILE:H | 27 | 0.03 |
| (1,366) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:16:ILE:HG21 | 16 | 0.03 |
| (1,366) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:16:ILE:HG22 | 16 | 0.03 |
| (1,366) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:16:ILE:HG23 | 16 | 0.03 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG21 | 5 | 0.03 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG22 | 5 | 0.03 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG23 | 5 | 0.03 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG21 | 11 | 0.03 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG22 | 11 | 0.03 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG23 | 11 | 0.03 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG21 | 13 | 0.03 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG22 | 13 | 0.03 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG23 | 13 | 0.03 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG21 | 20 | 0.03 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG22 | 20 | 0.03 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG23 | 20 | 0.03 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG21 | 25 | 0.03 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG22 | 25 | 0.03 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG23 | 25 | 0.03 |
| (1,360) | 1:A:17:LEU:HA | 1:A:19:ILE:HG21 | 3 | 0.03 |
| (1,360) | 1:A:17:LEU:HA | 1:A:19:ILE:HG22 | 3 | 0.03 |
| (1,360) | 1:A:17:LEU:HA | 1:A:19:ILE:HG23 | 3 | 0.03 |
| (1,360) | 1:A:17:LEU:HA | 1:A:19:ILE:HG21 | 17 | 0.03 |
| (1,360) | 1:A:17:LEU:HA | 1:A:19:ILE:HG22 | 17 | 0.03 |
| (1,360) | 1:A:17:LEU:HA | 1:A:19:ILE:HG23 | 17 | 0.03 |
| (1,316) | 1:A:40:MET:HB2 | 1:A:39:LEU:HD21 | 7 | 0.03 |
| (1,316) | 1:A:40:MET:HB2 | 1:A:39:LEU:HD22 | 7 | 0.03 |
| (1,316) | 1:A:40:MET:HB2 | 1:A:39:LEU:HD23 | 7 | 0.03 |
| (1,316) | 1:A:40:MET:HB2 | 1:A:39:LEU:HD21 | 19 | 0.03 |
| (1,316) | 1:A:40:MET:HB2 | 1:A:39:LEU:HD22 | 19 | 0.03 |
| (1,316) | 1:A:40:MET:HB2 | 1:A:39:LEU:HD23 | 19 | 0.03 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 1 | 0.03 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 1 | 0.03 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 1 | 0.03 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 4 | 0.03 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 4 | 0.03 |
| | l . | 1 | <u> </u> | d on nort nago |



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

| Key | Atom-1 | $\mathbf{Atom}	extbf{-2}$ | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|---------------------------|-------|---------------|
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 4 | 0.03 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 5 | 0.03 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 5 | 0.03 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 5 | 0.03 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 6 | 0.03 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 6 | 0.03 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 6 | 0.03 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 9 | 0.03 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 9 | 0.03 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 9 | 0.03 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 30 | 0.03 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 30 | 0.03 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 30 | 0.03 |
| (1,306) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:38:SER:H | 13 | 0.03 |
| (1,297) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:16:ILE:HA | 25 | 0.03 |
| (1,297) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:16:ILE:HA | 25 | 0.03 |
| (1,297) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:16:ILE:HA | 25 | 0.03 |
| (1,297) | 1:A:17:LEU:HD21 | 1:A:16:ILE:HA | 25 | 0.03 |
| (1,297) | 1:A:17:LEU:HD22 | 1:A:16:ILE:HA | 25 | 0.03 |
| (1,297) | 1:A:17:LEU:HD23 | 1:A:16:ILE:HA | 25 | 0.03 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 6 | 0.03 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 6 | 0.03 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 6 | 0.03 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 8 | 0.03 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 8 | 0.03 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 8 | 0.03 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:62:ARG:HG3 | 2 | 0.03 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:62:ARG:HG3 | 2 | 0.03 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:62:ARG:HG3 | 2 | 0.03 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:62:ARG:HG3 | 10 | 0.03 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:62:ARG:HG3 | 10 | 0.03 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:62:ARG:HG3 | 10 | 0.03 |
| (1,229) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD21 | 4 | 0.03 |
| (1,229) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD22 | 4 | 0.03 |
| (1,229) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD23 | 4 | 0.03 |
| (1,229) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD21 | 12 | 0.03 |
| (1,229) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD22 | 12 | 0.03 |
| (1,229) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD23 | 12 | 0.03 |
| (1,229) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD21 | 21 | 0.03 |
| (1,229) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD22 | 21 | 0.03 |
| (1,229) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD23 | 21 | 0.03 |
| (1,228) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:31:LEU:HD21 | 19 | 0.03 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,228) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:31:LEU:HD22 | 19 | 0.03 |
| (1,228) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:31:LEU:HD23 | 19 | 0.03 |
| (1,221) | 1:A:31:LEU:HB2 | 1:A:36:LEU:HB2 | 13 | 0.03 |
| (1,213) | 1:A:30:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HA | 8 | 0.03 |
| (1,213) | 1:A:30:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HA | 25 | 0.03 |
| (1,194) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HG | 20 | 0.03 |
| (1,194) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HG | 29 | 0.03 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:74:SER:H | 15 | 0.03 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:69:LEU:H | 15 | 0.03 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 5 | 0.03 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 5 | 0.03 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 5 | 0.03 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 18 | 0.03 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 18 | 0.03 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 18 | 0.03 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 21 | 0.03 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 21 | 0.03 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 21 | 0.03 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG21 | 1 | 0.03 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG22 | 1 | 0.03 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG23 | 1 | 0.03 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG21 | 6 | 0.03 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG22 | 6 | 0.03 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG23 | 6 | 0.03 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG21 | 23 | 0.03 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG22 | 23 | 0.03 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG23 | 23 | 0.03 |
| (1,1731) | 1:A:4:GLU:H | 1:A:3:GLY:H | 13 | 0.03 |
| (1,1726) | 1:A:80:THR:H | 1:A:81:GLU:H | 20 | 0.03 |
| (1,1726) | 1:A:80:THR:H | 1:A:81:GLU:H | 26 | 0.03 |
| (1,1710) | 1:A:63:GLN:H | 1:A:64:LEU:H | 20 | 0.03 |
| (1,1710) | 1:A:63:GLN:H | 1:A:64:LEU:H | 23 | 0.03 |
| (1,171) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:21:ASP:HA | 25 | 0.03 |
| (1,1701) | 1:A:47:ILE:H | 1:A:48:LEU:H | 25 | 0.03 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:9:LEU:HD21 | 26 | 0.03 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:9:LEU:HD22 | 26 | 0.03 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:9:LEU:HD23 | 26 | 0.03 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:48:LEU:HD11 | 26 | 0.03 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:48:LEU:HD12 | 26 | 0.03 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:48:LEU:HD13 | 26 | 0.03 |
| (1,1692) | 1:A:33:ASP:H | 1:A:36:LEU:H | 16 | 0.03 |
| (1,1646) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:9:LEU:H | 7 | 0.03 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1642) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:6:GLN:HE21 | 4 | 0.03 |
| (1,1642) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:6:GLN:HE21 | 4 | 0.03 |
| (1,1642) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:6:GLN:HE21 | 4 | 0.03 |
| (1,1642) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:6:GLN:HE21 | 21 | 0.03 |
| (1,1642) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:6:GLN:HE21 | 21 | 0.03 |
| (1,1642) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:6:GLN:HE21 | 21 | 0.03 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG21 | 8 | 0.03 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG22 | 8 | 0.03 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG23 | 8 | 0.03 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:9:LEU:HD21 | 18 | 0.03 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:9:LEU:HD22 | 18 | 0.03 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:9:LEU:HD23 | 18 | 0.03 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:9:LEU:HD21 | 18 | 0.03 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:9:LEU:HD22 | 18 | 0.03 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:9:LEU:HD23 | 18 | 0.03 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:9:LEU:HD21 | 21 | 0.03 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:9:LEU:HD22 | 21 | 0.03 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:9:LEU:HD23 | 21 | 0.03 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:9:LEU:HD21 | 21 | 0.03 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:9:LEU:HD22 | 21 | 0.03 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:9:LEU:HD23 | 21 | 0.03 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:9:LEU:HD21 | 22 | 0.03 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:9:LEU:HD22 | 22 | 0.03 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:9:LEU:HD23 | 22 | 0.03 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:9:LEU:HD21 | 22 | 0.03 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:9:LEU:HD22 | 22 | 0.03 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:9:LEU:HD23 | 22 | 0.03 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 12 | 0.03 |
| (1,1595) | 1:A:68:LYS:HB3 | 1:A:64:LEU:H | 12 | 0.03 |
| (1,1589) | 1:A:20:ARG:HG3 | 1:A:67:ARG:HE | 20 | 0.03 |
| (1,1589) | 1:A:20:ARG:HG3 | 1:A:67:ARG:HE | 24 | 0.03 |
| (1,1588) | 1:A:7:ARG:HG2 | 1:A:12:ALA:H | 24 | 0.03 |
| (1,1588) | 1:A:7:ARG:HG3 | 1:A:12:ALA:H | 24 | 0.03 |
| (1,1587) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:75:LYS:HE2 | 17 | 0.03 |
| (1,1587) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:75:LYS:HE3 | 17 | 0.03 |
| (1,1587) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:75:LYS:HE2 | 19 | 0.03 |
| (1,1587) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:75:LYS:HE3 | 19 | 0.03 |
| (1,1585) | 1:A:59:ARG:HG3 | 1:A:57:PRO:HB3 | 14 | 0.03 |
| (1,1580) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:20:ARG:HD2 | 2 | 0.03 |
| (1,1580) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:20:ARG:HD3 | 2 | 0.03 |
| (1,1580) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:20:ARG:HD2 | 2 | 0.03 |
| (1,1580) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:20:ARG:HD3 | 2 | 0.03 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|-------|---------------|
| (1,1580) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:20:ARG:HD2 | 2 | 0.03 |
| (1,1580) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:20:ARG:HD3 | 2 | 0.03 |
| (1,1578) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:22:LEU:HA | 9 | 0.03 |
| (1,1578) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:22:LEU:HA | 9 | 0.03 |
| (1,1578) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:22:LEU:HA | 9 | 0.03 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:65:THR:HA | 1 | 0.03 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:65:THR:HA | 1 | 0.03 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:65:THR:HA | 1 | 0.03 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:65:THR:HA | 8 | 0.03 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:65:THR:HA | 8 | 0.03 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:65:THR:HA | 8 | 0.03 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:65:THR:HA | 12 | 0.03 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:65:THR:HA | 12 | 0.03 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:65:THR:HA | 12 | 0.03 |
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:13:VAL:H | 1 | 0.03 |
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:13:VAL:H | 1 | 0.03 |
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:13:VAL:H | 1 | 0.03 |
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:13:VAL:H | 14 | 0.03 |
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:13:VAL:H | 14 | 0.03 |
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:13:VAL:H | 14 | 0.03 |
| (1,1574) | 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:40:MET:HG2 | 6 | 0.03 |
| (1,1574) | 1:A:16:ILE:HG22 | 1:A:40:MET:HG2 | 6 | 0.03 |
| (1,1574) | 1:A:16:ILE:HG23 | 1:A:40:MET:HG2 | 6 | 0.03 |
| (1,1574) | 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:40:MET:HG2 | 19 | 0.03 |
| (1,1574) | 1:A:16:ILE:HG22 | 1:A:40:MET:HG2 | 19 | 0.03 |
| (1,1574) | 1:A:16:ILE:HG23 | 1:A:40:MET:HG2 | 19 | 0.03 |
| (1,1573) | 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:40:MET:HG3 | 27 | 0.03 |
| (1,1573) | 1:A:16:ILE:HG22 | 1:A:40:MET:HG3 | 27 | 0.03 |
| (1,1573) | 1:A:16:ILE:HG23 | 1:A:40:MET:HG3 | 27 | 0.03 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:26:ASN:H | 7 | 0.03 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:26:ASN:H | 7 | 0.03 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:26:ASN:H | 7 | 0.03 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:26:ASN:H | 20 | 0.03 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:26:ASN:H | 20 | 0.03 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:26:ASN:H | 20 | 0.03 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:26:ASN:H | 21 | 0.03 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:26:ASN:H | 21 | 0.03 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:26:ASN:H | 21 | 0.03 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:26:ASN:H | 26 | 0.03 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:26:ASN:H | 26 | 0.03 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:26:ASN:H | 26 | 0.03 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:26:ASN:H | 27 | 0.03 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:26:ASN:H | 27 | 0.03 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:26:ASN:H | 27 | 0.03 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:42:VAL:HA | 1 | 0.03 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:42:VAL:HA | 1 | 0.03 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:42:VAL:HA | 1 | 0.03 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:42:VAL:HA | 5 | 0.03 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:42:VAL:HA | 5 | 0.03 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:42:VAL:HA | 5 | 0.03 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:42:VAL:HA | 12 | 0.03 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:42:VAL:HA | 12 | 0.03 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:42:VAL:HA | 12 | 0.03 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:42:VAL:HA | 16 | 0.03 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:42:VAL:HA | 16 | 0.03 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:42:VAL:HA | 16 | 0.03 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:42:VAL:HA | 22 | 0.03 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:42:VAL:HA | 22 | 0.03 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:42:VAL:HA | 22 | 0.03 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:42:VAL:HA | 23 | 0.03 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:42:VAL:HA | 23 | 0.03 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:42:VAL:HA | 23 | 0.03 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:42:VAL:HA | 27 | 0.03 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:42:VAL:HA | 27 | 0.03 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:42:VAL:HA | 27 | 0.03 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:45:ARG:HE | 14 | 0.03 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG22 | 1:A:45:ARG:HE | 14 | 0.03 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG23 | 1:A:45:ARG:HE | 14 | 0.03 |
| (1,1534) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:70:GLN:HE21 | 23 | 0.03 |
| (1,1534) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:70:GLN:HE21 | 23 | 0.03 |
| (1,1534) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:70:GLN:HE21 | 23 | 0.03 |
| (1,1531) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:72:MET:H | 8 | 0.03 |
| (1,1531) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:72:MET:H | 8 | 0.03 |
| (1,1531) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:72:MET:H | 8 | 0.03 |
| (1,1523) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:70:GLN:H | 16 | 0.03 |
| (1,1523) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:70:GLN:H | 19 | 0.03 |
| (1,1521) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:9:LEU:HD11 | 3 | 0.03 |
| (1,1521) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:9:LEU:HD12 | 3 | 0.03 |
| (1,1521) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:9:LEU:HD13 | 3 | 0.03 |
| (1,1509) | 1:A:72:MET:HG2 | 1:A:9:LEU:HD11 | 7 | 0.03 |
| (1,1509) | 1:A:72:MET:HG2 | 1:A:9:LEU:HD12 | 7 | 0.03 |
| (1,1509) | 1:A:72:MET:HG2 | 1:A:9:LEU:HD13 | 7 | 0.03 |
| (1,1509) | 1:A:72:MET:HG2 | 1:A:9:LEU:HD11 | 16 | 0.03 |
| (1,1509) | 1:A:72:MET:HG2 | 1:A:9:LEU:HD12 | 16 | 0.03 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|-------|---------------|
| (1,1509) | 1:A:72:MET:HG2 | 1:A:9:LEU:HD13 | 16 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD2 | 6 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD3 | 6 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 6 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 6 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD2 | 6 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD3 | 6 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD2 | 15 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD3 | 15 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 15 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 15 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD2 | 15 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD3 | 15 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD2 | 19 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD3 | 19 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 19 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 19 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD2 | 19 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD3 | 19 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD2 | 21 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD3 | 21 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 21 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 21 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD2 | 21 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD3 | 21 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD2 | 29 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD3 | 29 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 29 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 29 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD2 | 29 | 0.03 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD3 | 29 | 0.03 |
| (1,1503) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:49:GLU:H | 2 | 0.03 |
| (1,1503) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:49:GLU:H | 2 | 0.03 |
| (1,1503) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:49:GLU:H | 2 | 0.03 |
| (1,1498) | 1:A:67:ARG:HD2 | 1:A:69:LEU:H | 7 | 0.03 |
| (1,1498) | 1:A:67:ARG:HD2 | 1:A:69:LEU:H | 15 | 0.03 |
| (1,1497) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:63:GLN:HB2 | 11 | 0.03 |
| (1,1497) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:63:GLN:HB2 | 11 | 0.03 |
| (1,1497) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:63:GLN:HB2 | 11 | 0.03 |
| (1,1494) | 1:A:46:GLN:HG2 | 1:A:50:ARG:HD2 | 19 | 0.03 |
| (1,1494) | 1:A:46:GLN:HG2 | 1:A:50:ARG:HD3 | 19 | 0.03 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:46:GLN:HG2 | 11 | 0.03 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:46:GLN:HG2 | 11 | 0.03 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:46:GLN:HG2 | 11 | 0.03 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:19:ILE:HB | 22 | 0.03 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:19:ILE:HB | 22 | 0.03 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:19:ILE:HB | 22 | 0.03 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:19:ILE:HB | 26 | 0.03 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:19:ILE:HB | 26 | 0.03 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:19:ILE:HB | 26 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG11 | 3 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG12 | 3 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG13 | 3 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG11 | 3 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG12 | 3 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG13 | 3 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG11 | 3 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG12 | 3 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG13 | 3 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG11 | 4 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG12 | 4 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG13 | 4 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG11 | 4 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG12 | 4 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG13 | 4 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG11 | 4 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG12 | 4 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG13 | 4 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG11 | 5 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG12 | 5 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG13 | 5 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG11 | 5 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG12 | 5 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG13 | 5 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG11 | 5 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG12 | 5 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG13 | 5 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG11 | 9 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG12 | 9 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG13 | 9 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG11 | 9 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG12 | 9 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG13 | 9 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG11 | 9 | 0.03 |



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

| Key | $\frac{1 \text{ from previous page.}}{\text{Atom-1}}$ | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|---|-----------------|-------|---------------|
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG12 | 9 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG13 | 9 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG11 | 10 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG12 | 10 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG13 | 10 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG11 | 10 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG12 | 10 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG13 | 10 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG11 | 10 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG12 | 10 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG13 | 10 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG11 | 15 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG12 | 15 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG13 | 15 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG11 | 15 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG12 | 15 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG13 | 15 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG11 | 15 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG12 | 15 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG13 | 15 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG11 | 17 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG12 | 17 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG13 | 17 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG11 | 17 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG12 | 17 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG13 | 17 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG11 | 17 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG12 | 17 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG13 | 17 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG11 | 19 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG12 | 19 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG13 | 19 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG11 | 19 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG12 | 19 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG13 | 19 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG11 | 19 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG12 | 19 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG13 | 19 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG11 | 29 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG12 | 29 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG13 | 29 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG11 | 29 | 0.03 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG12 | 29 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG13 | 29 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG11 | 29 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG12 | 29 | 0.03 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG13 | 29 | 0.03 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG11 | 10 | 0.03 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG12 | 10 | 0.03 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG13 | 10 | 0.03 |
| (1,1447) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:17:LEU:HG | 21 | 0.03 |
| (1,1447) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:17:LEU:HG | 21 | 0.03 |
| (1,1447) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:17:LEU:HG | 21 | 0.03 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:47:ILE:HG13 | 1 | 0.03 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:47:ILE:HG13 | 1 | 0.03 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:47:ILE:HG13 | 1 | 0.03 |
| (1,1429) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:39:LEU:H | 18 | 0.03 |
| (1,1429) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:39:LEU:H | 18 | 0.03 |
| (1,1429) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:39:LEU:H | 18 | 0.03 |
| (1,1423) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:39:LEU:HG | 15 | 0.03 |
| (1,1423) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:39:LEU:HG | 15 | 0.03 |
| (1,1423) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:39:LEU:HG | 15 | 0.03 |
| (1,1411) | 1:A:42:VAL:HG11 | 1:A:43:GLU:HG3 | 8 | 0.03 |
| (1,1411) | 1:A:42:VAL:HG12 | 1:A:43:GLU:HG3 | 8 | 0.03 |
| (1,1411) | 1:A:42:VAL:HG13 | 1:A:43:GLU:HG3 | 8 | 0.03 |
| (1,1411) | 1:A:42:VAL:HG11 | 1:A:43:GLU:HG3 | 9 | 0.03 |
| (1,1411) | 1:A:42:VAL:HG12 | 1:A:43:GLU:HG3 | 9 | 0.03 |
| (1,1411) | 1:A:42:VAL:HG13 | 1:A:43:GLU:HG3 | 9 | 0.03 |
| (1,1407) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:44:VAL:H | 3 | 0.03 |
| (1,1407) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:44:VAL:H | 7 | 0.03 |
| (1,1407) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:44:VAL:H | 27 | 0.03 |
| (1,1407) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:44:VAL:H | 29 | 0.03 |
| (1,1407) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:44:VAL:H | 30 | 0.03 |
| (1,1404) | 1:A:42:VAL:HB | 1:A:42:VAL:H | 18 | 0.03 |
| (1,1402) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:ARG:HB3 | 3 | 0.03 |
| (1,1402) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:ARG:HB3 | 21 | 0.03 |
| (1,1393) | 1:A:44:VAL:HA | 1:A:48:LEU:HG | 5 | 0.03 |
| (1,1393) | 1:A:44:VAL:HA | 1:A:48:LEU:HG | 6 | 0.03 |
| (1,1393) | 1:A:44:VAL:HA | 1:A:48:LEU:HG | 7 | 0.03 |
| (1,1393) | 1:A:44:VAL:HA | 1:A:48:LEU:HG | 10 | 0.03 |
| (1,1393) | 1:A:44:VAL:HA | 1:A:48:LEU:HG | 12 | 0.03 |
| (1,1393) | 1:A:44:VAL:HA | 1:A:48:LEU:HG | 26 | 0.03 |
| (1,1376) | 1:A:12:ALA:HB1 | 1:A:7:ARG:HD2 | 9 | 0.03 |
| (1,1376) | 1:A:12:ALA:HB1 | 1:A:7:ARG:HD3 | 9 | 0.03 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1376) | 1:A:12:ALA:HB2 | 1:A:7:ARG:HD2 | 9 | 0.03 |
| (1,1376) | 1:A:12:ALA:HB2 | 1:A:7:ARG:HD3 | 9 | 0.03 |
| (1,1376) | 1:A:12:ALA:HB3 | 1:A:7:ARG:HD2 | 9 | 0.03 |
| (1,1376) | 1:A:12:ALA:HB3 | 1:A:7:ARG:HD3 | 9 | 0.03 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HB2 | 5 | 0.03 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 5 | 0.03 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:68:LYS:HB2 | 5 | 0.03 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:68:LYS:HB3 | 5 | 0.03 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HB2 | 6 | 0.03 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 6 | 0.03 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:68:LYS:HB2 | 6 | 0.03 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:68:LYS:HB3 | 6 | 0.03 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HB2 | 28 | 0.03 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 28 | 0.03 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:68:LYS:HB2 | 28 | 0.03 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:68:LYS:HB3 | 28 | 0.03 |
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:69:LEU:H | 3 | 0.03 |
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:69:LEU:H | 3 | 0.03 |
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:69:LEU:H | 29 | 0.03 |
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:69:LEU:H | 29 | 0.03 |
| (1,1314) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:68:LYS:HD2 | 29 | 0.03 |
| (1,1314) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:68:LYS:HD3 | 29 | 0.03 |
| (1,1314) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:68:LYS:HD2 | 29 | 0.03 |
| (1,1314) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:68:LYS:HD3 | 29 | 0.03 |
| (1,1314) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:68:LYS:HD2 | 29 | 0.03 |
| (1,1314) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:68:LYS:HD3 | 29 | 0.03 |
| (1,1314) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:68:LYS:HD2 | 30 | 0.03 |
| (1,1314) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:68:LYS:HD3 | 30 | 0.03 |
| (1,1314) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:68:LYS:HD2 | 30 | 0.03 |
| (1,1314) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:68:LYS:HD3 | 30 | 0.03 |
| (1,1314) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:68:LYS:HD2 | 30 | 0.03 |
| (1,1314) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:68:LYS:HD3 | 30 | 0.03 |
| (1,1311) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:68:LYS:HD2 | 4 | 0.03 |
| (1,1311) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:68:LYS:HD3 | 4 | 0.03 |
| (1,1311) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:68:LYS:HD2 | 5 | 0.03 |
| (1,1311) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:68:LYS:HD3 | 5 | 0.03 |
| (1,1311) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:68:LYS:HD2 | 23 | 0.03 |
| (1,1311) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:68:LYS:HD3 | 23 | 0.03 |
| (1,1308) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:63:GLN:HE21 | 4 | 0.03 |
| (1,1308) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:63:GLN:HE21 | 15 | 0.03 |
| (1,1308) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:63:GLN:HE21 | 29 | 0.03 |
| (1,1303) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:31:LEU:HB3 | 17 | 0.03 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1285) | 1:A:62:ARG:HD2 | 1:A:32:ALA:HB1 | 16 | 0.03 |
| (1,1285) | 1:A:62:ARG:HD2 | 1:A:32:ALA:HB2 | 16 | 0.03 |
| (1,1285) | 1:A:62:ARG:HD2 | 1:A:32:ALA:HB3 | 16 | 0.03 |
| (1,1267) | 1:A:61:VAL:HG21 | 1:A:60:GLU:HB3 | 29 | 0.03 |
| (1,1267) | 1:A:61:VAL:HG22 | 1:A:60:GLU:HB3 | 29 | 0.03 |
| (1,1267) | 1:A:61:VAL:HG23 | 1:A:60:GLU:HB3 | 29 | 0.03 |
| (1,1252) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:63:GLN:HE22 | 3 | 0.03 |
| (1,1252) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:63:GLN:HE22 | 11 | 0.03 |
| (1,1252) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:63:GLN:HE22 | 12 | 0.03 |
| (1,1252) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:63:GLN:HE22 | 14 | 0.03 |
| (1,1252) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:63:GLN:HE22 | 15 | 0.03 |
| (1,1252) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:63:GLN:HE22 | 29 | 0.03 |
| (1,1252) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:63:GLN:HE22 | 30 | 0.03 |
| (1,1239) | 1:A:60:GLU:HB3 | 1:A:56:LEU:HB2 | 4 | 0.03 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:57:PRO:HB3 | 8 | 0.03 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:57:PRO:HB3 | 8 | 0.03 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:57:PRO:HB3 | 8 | 0.03 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:57:PRO:HB3 | 10 | 0.03 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:57:PRO:HB3 | 10 | 0.03 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:57:PRO:HB3 | 10 | 0.03 |
| (1,1204) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:61:VAL:HB | 29 | 0.03 |
| (1,12) | 1:A:41:GLY:HA2 | 1:A:61:VAL:HG11 | 6 | 0.03 |
| (1,12) | 1:A:41:GLY:HA2 | 1:A:61:VAL:HG12 | 6 | 0.03 |
| (1,12) | 1:A:41:GLY:HA2 | 1:A:61:VAL:HG13 | 6 | 0.03 |
| (1,12) | 1:A:41:GLY:HA2 | 1:A:58:ILE:HD11 | 6 | 0.03 |
| (1,12) | 1:A:41:GLY:HA2 | 1:A:58:ILE:HD12 | 6 | 0.03 |
| (1,12) | 1:A:41:GLY:HA2 | 1:A:58:ILE:HD13 | 6 | 0.03 |
| (1,12) | 1:A:41:GLY:HA2 | 1:A:64:LEU:HD11 | 6 | 0.03 |
| (1,12) | 1:A:41:GLY:HA2 | 1:A:64:LEU:HD12 | 6 | 0.03 |
| (1,12) | 1:A:41:GLY:HA2 | 1:A:64:LEU:HD13 | 6 | 0.03 |
| (1,119) | 1:A:4:GLU:HB3 | 1:A:5:ALA:H | 29 | 0.03 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HB2 | 10 | 0.03 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HG2 | 10 | 0.03 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HB2 | 11 | 0.03 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HG2 | 11 | 0.03 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HB2 | 19 | 0.03 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HG2 | 19 | 0.03 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HB2 | 27 | 0.03 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HG2 | 27 | 0.03 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HB2 | 30 | 0.03 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HG2 | 30 | 0.03 |
| (1,1172) | 1:A:55:VAL:HA | 1:A:57:PRO:HG3 | 19 | 0.03 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD21 | 11 | 0.03 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD22 | 11 | 0.03 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD23 | 11 | 0.03 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD21 | 12 | 0.03 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD22 | 12 | 0.03 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD23 | 12 | 0.03 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD21 | 22 | 0.03 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD22 | 22 | 0.03 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD23 | 22 | 0.03 |
| (1,1147) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:48:LEU:HB3 | 14 | 0.03 |
| (1,1147) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:48:LEU:HB3 | 16 | 0.03 |
| (1,1108) | 1:A:48:LEU:HA | 1:A:52:HIS:HB3 | 25 | 0.03 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD21 | 1:A:42:VAL:H | 3 | 0.03 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD22 | 1:A:42:VAL:H | 3 | 0.03 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD23 | 1:A:42:VAL:H | 3 | 0.03 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD21 | 1:A:42:VAL:H | 4 | 0.03 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD22 | 1:A:42:VAL:H | 4 | 0.03 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD23 | 1:A:42:VAL:H | 4 | 0.03 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD21 | 1:A:42:VAL:H | 22 | 0.03 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD22 | 1:A:42:VAL:H | 22 | 0.03 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD23 | 1:A:42:VAL:H | 22 | 0.03 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD21 | 1:A:42:VAL:H | 25 | 0.03 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD22 | 1:A:42:VAL:H | 25 | 0.03 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD23 | 1:A:42:VAL:H | 25 | 0.03 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD21 | 1:A:42:VAL:H | 26 | 0.03 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD22 | 1:A:42:VAL:H | 26 | 0.03 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD23 | 1:A:42:VAL:H | 26 | 0.03 |
| (1,1064) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:42:VAL:H | 30 | 0.03 |
| (1,1064) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:42:VAL:H | 30 | 0.03 |
| (1,1064) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:42:VAL:H | 30 | 0.03 |
| (1,1061) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:38:SER:H | 3 | 0.03 |
| (1,1061) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:38:SER:H | 3 | 0.03 |
| (1,1061) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:38:SER:H | 3 | 0.03 |
| (1,1061) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:38:SER:H | 4 | 0.03 |
| (1,1061) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:38:SER:H | 4 | 0.03 |
| (1,1061) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:38:SER:H | 4 | 0.03 |
| (1,1061) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:38:SER:H | 9 | 0.03 |
| (1,1061) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:38:SER:H | 9 | 0.03 |
| (1,1061) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:38:SER:H | 9 | 0.03 |
| (1,1056) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:62:ARG:HA | 13 | 0.03 |
| (1,1056) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:62:ARG:HA | 13 | 0.03 |
| (1,1056) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:62:ARG:HA | 13 | 0.03 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG21 | 20 | 0.03 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG22 | 20 | 0.03 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG23 | 20 | 0.03 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG21 | 20 | 0.03 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG22 | 20 | 0.03 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG23 | 20 | 0.03 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG21 | 20 | 0.03 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG22 | 20 | 0.03 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG23 | 20 | 0.03 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG21 | 29 | 0.03 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG22 | 29 | 0.03 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG23 | 29 | 0.03 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG21 | 29 | 0.03 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG22 | 29 | 0.03 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG23 | 29 | 0.03 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG21 | 29 | 0.03 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG22 | 29 | 0.03 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG23 | 29 | 0.03 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:31:LEU:HA | 18 | 0.03 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:31:LEU:HA | 18 | 0.03 |
| (1,1017) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:31:LEU:HA | 18 | 0.03 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:31:LEU:HA | 6 | 0.03 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:31:LEU:HA | 6 | 0.03 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:31:LEU:HA | 6 | 0.03 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:31:LEU:HA | 7 | 0.03 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:31:LEU:HA | 7 | 0.03 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:31:LEU:HA | 7 | 0.03 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:31:LEU:HA | 12 | 0.03 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:31:LEU:HA | 12 | 0.03 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:31:LEU:HA | 12 | 0.03 |
| (1,1005) | 1:A:33:ASP:HB3 | 1:A:30:SER:H | 10 | 0.03 |
| (1,1001) | 1:A:33:ASP:HB2 | 1:A:33:ASP:H | 27 | 0.03 |
| (1,97) | 1:A:52:HIS:HB2 | 1:A:54:LEU:HB3 | 17 | 0.02 |
| (1,968) | 1:A:27:LEU:HD11 | 1:A:67:ARG:HA | 28 | 0.02 |
| (1,968) | 1:A:27:LEU:HD12 | 1:A:67:ARG:HA | 28 | 0.02 |
| (1,968) | 1:A:27:LEU:HD13 | 1:A:67:ARG:HA | 28 | 0.02 |
| (1,931) | 1:A:57:PRO:HG3 | 1:A:60:GLU:HG2 | 2 | 0.02 |
| (1,931) | 1:A:57:PRO:HG3 | 1:A:60:GLU:HG3 | 2 | 0.02 |
| (1,882) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:70:GLN:H | 11 | 0.02 |
| (1,882) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:70:GLN:H | 11 | 0.02 |
| (1,882) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:70:GLN:H | 11 | 0.02 |
| (1,880) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:10:VAL:H | 15 | 0.02 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|-------|---------------|
| (1,880) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:10:VAL:H | 15 | 0.02 |
| (1,880) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:10:VAL:H | 15 | 0.02 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 6 | 0.02 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 6 | 0.02 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 6 | 0.02 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 16 | 0.02 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 16 | 0.02 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 16 | 0.02 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 24 | 0.02 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 24 | 0.02 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 24 | 0.02 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 26 | 0.02 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 26 | 0.02 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 26 | 0.02 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 29 | 0.02 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 29 | 0.02 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 29 | 0.02 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:23:ALA:HA | 5 | 0.02 |
| (1,85) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:25:ILE:HA | 5 | 0.02 |
| (1,845) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HB2 | 21 | 0.02 |
| (1,845) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HB3 | 21 | 0.02 |
| (1,845) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HB2 | 23 | 0.02 |
| (1,845) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:LYS:HB3 | 23 | 0.02 |
| (1,842) | 1:A:8:ASP:HA | 1:A:9:LEU:H | 18 | 0.02 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:9:LEU:HB3 | 4 | 0.02 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG2 | 4 | 0.02 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG3 | 4 | 0.02 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:9:LEU:HB3 | 13 | 0.02 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG2 | 13 | 0.02 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG3 | 13 | 0.02 |
| (1,808) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:30:SER:HA | 8 | 0.02 |
| (1,808) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:30:SER:HA | 8 | 0.02 |
| (1,808) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:30:SER:HA | 8 | 0.02 |
| (1,808) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:30:SER:HA | 11 | 0.02 |
| (1,808) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:30:SER:HA | 11 | 0.02 |
| (1,808) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:30:SER:HA | 11 | 0.02 |
| (1,808) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:30:SER:HA | 30 | 0.02 |
| (1,808) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:30:SER:HA | 30 | 0.02 |
| (1,808) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:30:SER:HA | 30 | 0.02 |
| (1,785) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HB3 | 20 | 0.02 |
| (1,785) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HB3 | 22 | 0.02 |
| (1,785) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HB3 | 23 | 0.02 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD11 | 3 | 0.02 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD12 | 3 | 0.02 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD13 | 3 | 0.02 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 3 | 0.02 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 3 | 0.02 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 3 | 0.02 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD11 | 7 | 0.02 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD12 | 7 | 0.02 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD13 | 7 | 0.02 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 7 | 0.02 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 7 | 0.02 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 7 | 0.02 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD11 | 10 | 0.02 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD12 | 10 | 0.02 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD13 | 10 | 0.02 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 10 | 0.02 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 10 | 0.02 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 10 | 0.02 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD11 | 28 | 0.02 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD12 | 28 | 0.02 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD13 | 28 | 0.02 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 28 | 0.02 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 28 | 0.02 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 28 | 0.02 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD11 | 30 | 0.02 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD12 | 30 | 0.02 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD13 | 30 | 0.02 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 30 | 0.02 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 30 | 0.02 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 30 | 0.02 |
| (1,778) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:6:GLN:HE21 | 19 | 0.02 |
| (1,743) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:72:MET:H | 20 | 0.02 |
| (1,743) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:72:MET:H | 20 | 0.02 |
| (1,740) | 1:A:70:GLN:HA | 1:A:10:VAL:HG21 | 10 | 0.02 |
| (1,740) | 1:A:70:GLN:HA | 1:A:10:VAL:HG22 | 10 | 0.02 |
| (1,740) | 1:A:70:GLN:HA | 1:A:10:VAL:HG23 | 10 | 0.02 |
| (1,740) | 1:A:70:GLN:HA | 1:A:10:VAL:HG21 | 23 | 0.02 |
| (1,740) | 1:A:70:GLN:HA | 1:A:10:VAL:HG22 | 23 | 0.02 |
| (1,740) | 1:A:70:GLN:HA | 1:A:10:VAL:HG23 | 23 | 0.02 |
| (1,740) | 1:A:70:GLN:HA | 1:A:10:VAL:HG21 | 28 | 0.02 |
| (1,740) | 1:A:70:GLN:HA | 1:A:10:VAL:HG22 | 28 | 0.02 |
| (1,740) | 1:A:70:GLN:HA | 1:A:10:VAL:HG23 | 28 | 0.02 |



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

| (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 1 0.02 (1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 11 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 4 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 4 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 6 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 9 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 16 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,700) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,700) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 1 <td< th=""><th>Key</th><th>Atom-1</th><th>Atom-2</th><th>Model</th><th>Violation (Å)</th></td<> | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 4 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 4 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 6 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 6 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 9 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 9 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 16 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 16 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 16 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,700) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,700) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:72:MET:H 1 <th< td=""><td>(1,732)</td><td>1:A:63:GLN:HG3</td><td>1:A:60:GLU:HA</td><td>1</td><td>0.02</td></th<> | (1,732) | 1:A:63:GLN:HG3 | 1:A:60:GLU:HA | 1 | 0.02 |
| (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 4 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 6 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 6 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 9 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 9 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 16 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 16 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 16 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,700) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,700) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,700) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:72:MET:H 1 <t< td=""><td>(1,732)</td><td>1:A:63:GLN:HG3</td><td>1:A:60:GLU:HA</td><td>11</td><td>0.02</td></t<> | (1,732) | 1:A:63:GLN:HG3 | 1:A:60:GLU:HA | 11 | 0.02 |
| (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 6 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 6 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 9 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 9 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 16 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,700) 1:A:59:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 1 | (1,706) | 1:A:59:ARG:HD2 | 1:A:59:ARG:H | 4 | 0.02 |
| (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 6 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 9 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 9 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 16 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 16 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,700) 1:A:59:LEU:HD221 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,700) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 2 | (1,706) | 1:A:59:ARG:HD3 | 1:A:59:ARG:H | 4 | 0.02 |
| (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 9 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 9 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 16 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 16 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,700) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 26 0.02 (1,700) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 25 0. | (1,706) | 1:A:59:ARG:HD2 | 1:A:59:ARG:H | 6 | 0.02 |
| (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 9 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 16 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 16 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 26 0.02 (1,700) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 | (1,706) | 1:A:59:ARG:HD3 | 1:A:59:ARG:H | 6 | 0.02 |
| (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 16 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 16 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02< | (1,706) | 1:A:59:ARG:HD2 | 1:A:59:ARG:H | 9 | 0.02 |
| (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 16 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 <td>(1,706)</td> <td>1:A:59:ARG:HD3</td> <td>1:A:59:ARG:H</td> <td>9</td> <td>0.02</td> | (1,706) | 1:A:59:ARG:HD3 | 1:A:59:ARG:H | 9 | 0.02 |
| (1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 25 0.02 <td>(1,706)</td> <td>1:A:59:ARG:HD2</td> <td>1:A:59:ARG:H</td> <td>16</td> <td>0.02</td> | (1,706) | 1:A:59:ARG:HD2 | 1:A:59:ARG:H | 16 | 0.02 |
| (1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 21 0.02 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 <td>(1,706)</td> <td>1:A:59:ARG:HD3</td> <td>1:A:59:ARG:H</td> <td>16</td> <td>0.02</td> | (1,706) | 1:A:59:ARG:HD3 | 1:A:59:ARG:H | 16 | 0.02 |
| (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 26 0.02 | (1,706) | 1:A:59:ARG:HD2 | 1:A:59:ARG:H | 21 | 0.02 |
| (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 | (1,706) | 1:A:59:ARG:HD3 | 1:A:59:ARG:H | 21 | 0.02 |
| (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 | (1,700) | 1:A:59:ARG:HA | 1:A:62:ARG:HD2 | 26 | 0.02 |
| (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 | (1,70) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:72:MET:H | 1 | 0.02 |
| (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 | (1,70) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:72:MET:H | 1 | 0.02 |
| (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 <td>(1,70)</td> <td>1:A:9:LEU:HD23</td> <td>1:A:72:MET:H</td> <td>1</td> <td>0.02</td> | (1,70) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:72:MET:H | 1 | 0.02 |
| (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD21 21 0.0 | (1,70) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:71:GLU:H | 1 | 0.02 |
| (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 1 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD21 21 0.0 | , | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:71:GLU:H | 1 | 0.02 |
| (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD21 21 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD23 21 <t< td=""><td></td><td>1:A:9:LEU:HD23</td><td>1:A:71:GLU:H</td><td>1</td><td>0.02</td></t<> | | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:71:GLU:H | 1 | 0.02 |
| (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD21 21 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD23 21 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD23 21 | · · / | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:72:MET:H | 25 | 0.02 |
| (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD21 21 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD22 21 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD23 21 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD23 21 0.02 | , , | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:72:MET:H | 25 | 0.02 |
| (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD21 21 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD23 21 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD23 21 0.02 | (1,70) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:72:MET:H | 25 | 0.02 |
| (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 25 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD21 21 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD22 21 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD23 21 0.02 | | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:71:GLU:H | 25 | 0.02 |
| (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD21 21 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD22 21 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD23 21 0.02 | (1,70) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:71:GLU:H | 25 | 0.02 |
| (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD21 21 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD22 21 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD23 21 0.02 | (1,70) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:71:GLU:H | 25 | 0.02 |
| (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD21 21 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD22 21 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD23 21 0.02 | (1,70) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:72:MET:H | 26 | 0.02 |
| (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD21 21 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD22 21 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD23 21 0.02 | (1,70) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:72:MET:H | 26 | 0.02 |
| (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD21 21 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD22 21 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD23 21 0.02 | (1,70) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:72:MET:H | 26 | 0.02 |
| (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 26 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD21 21 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD22 21 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD23 21 0.02 | (1,70) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:71:GLU:H | 26 | 0.02 |
| (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD21 21 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD22 21 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD23 21 0.02 | (1,70) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:71:GLU:H | 26 | 0.02 |
| (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD22 21 0.02 (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD23 21 0.02 | (1,70) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:71:GLU:H | 26 | 0.02 |
| (1,684) 1:A:43:GLU:HG3 1:A:39:LEU:HD23 21 0.02 | (1,684) | 1:A:43:GLU:HG3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 21 | 0.02 |
| | (1,684) | 1:A:43:GLU:HG3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 21 | 0.02 |
| | · · / | 1:A:43:GLU:HG3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 21 | 0.02 |
| (1,000) 1:A:49:GLU:HG2 1:A:40:GLN:HA 15 0.02 | (1,668) | 1:A:49:GLU:HG2 | 1:A:46:GLN:HA | 15 | 0.02 |
| (1,662) 1:A:49:GLU:HA 1:A:46:GLN:HA 7 0.02 | ` ′ | 1:A:49:GLU:HA | 1:A:46:GLN:HA | 7 | 0.02 |
| (1,662) 1:A:49:GLU:HA 1:A:46:GLN:HA 15 0.02 | (' | 1:A:49:GLU:HA | 1:A:46:GLN:HA | 15 | 0.02 |
| (1,66) 1:A:58:ILE:HD11 1:A:45:ARG:HE 2 0.02 | | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:45:ARG:HE | 2 | 0.02 |
| (1,66) 1:A:58:ILE:HD12 1:A:45:ARG:HE 2 0.02 | | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:45:ARG:HE | 2 | 0.02 |
| (1,66) 1:A:58:ILE:HD13 1:A:45:ARG:HE 2 0.02 | | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:45:ARG:HE | 2 | 0.02 |
| (1,66) 1:A:58:ILE:HD11 1:A:63:GLN:HE22 2 0.02 | (1,66) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:63:GLN:HE22 | 2 | 0.02 |
| (1,66) 1:A:58:ILE:HD12 1:A:63:GLN:HE22 2 0.02 | | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:63:GLN:HE22 | 2 | 0.02 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,66) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:63:GLN:HE22 | 2 | 0.02 |
| (1,66) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:29:SER:H | 2 | 0.02 |
| (1,66) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:29:SER:H | 2 | 0.02 |
| (1,66) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:29:SER:H | 2 | 0.02 |
| (1,66) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:H | 2 | 0.02 |
| (1,66) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:H | 2 | 0.02 |
| (1,66) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:H | 2 | 0.02 |
| (1,638) | 1:A:50:ARG:HD2 | 1:A:50:ARG:HA | 10 | 0.02 |
| (1,638) | 1:A:50:ARG:HD3 | 1:A:50:ARG:HA | 10 | 0.02 |
| (1,621) | 1:A:67:ARG:HD3 | 1:A:69:LEU:H | 9 | 0.02 |
| (1,607) | 1:A:67:ARG:HA | 1:A:67:ARG:HD3 | 27 | 0.02 |
| (1,603) | 1:A:66:LEU:HA | 1:A:69:LEU:HB3 | 13 | 0.02 |
| (1,599) | 1:A:66:LEU:HA | 1:A:69:LEU:H | 18 | 0.02 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:66:LEU:HA | 13 | 0.02 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:66:LEU:HA | 13 | 0.02 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:66:LEU:HA | 13 | 0.02 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:66:LEU:HA | 15 | 0.02 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:66:LEU:HA | 15 | 0.02 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:66:LEU:HA | 15 | 0.02 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:66:LEU:HA | 17 | 0.02 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:66:LEU:HA | 17 | 0.02 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:66:LEU:HA | 17 | 0.02 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:66:LEU:HA | 20 | 0.02 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:66:LEU:HA | 20 | 0.02 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:66:LEU:HA | 20 | 0.02 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:66:LEU:HA | 23 | 0.02 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:66:LEU:HA | 23 | 0.02 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:66:LEU:HA | 23 | 0.02 |
| (1,59) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:64:LEU:HB2 | 2 | 0.02 |
| (1,59) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:64:LEU:HB2 | 2 | 0.02 |
| (1,59) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:64:LEU:HB2 | 2 | 0.02 |
| (1,59) | 1:A:66:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HB2 | 2 | 0.02 |
| (1,59) | 1:A:66:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HB2 | 2 | 0.02 |
| (1,59) | 1:A:66:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HB2 | 2 | 0.02 |
| (1,58) | 1:A:66:LEU:HD21 | 1:A:10:VAL:HB | 13 | 0.02 |
| (1,58) | 1:A:66:LEU:HD22 | 1:A:10:VAL:HB | 13 | 0.02 |
| (1,58) | 1:A:66:LEU:HD23 | 1:A:10:VAL:HB | 13 | 0.02 |
| (1,58) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:43:GLU:HB2 | 13 | 0.02 |
| (1,58) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:43:GLU:HB2 | 13 | 0.02 |
| (1,58) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:43:GLU:HB2 | 13 | 0.02 |
| (1,58) | 1:A:66:LEU:HD21 | 1:A:10:VAL:HB | 15 | 0.02 |
| (1,58) | 1:A:66:LEU:HD22 | 1:A:10:VAL:HB | 15 | 0.02 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,58) | 1:A:66:LEU:HD23 | 1:A:10:VAL:HB | 15 | 0.02 |
| (1,58) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:43:GLU:HB2 | 15 | 0.02 |
| (1,58) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:43:GLU:HB2 | 15 | 0.02 |
| (1,58) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:43:GLU:HB2 | 15 | 0.02 |
| (1,577) | 1:A:66:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HB2 | 18 | 0.02 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB1 | 20 | 0.02 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB2 | 20 | 0.02 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB3 | 20 | 0.02 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB1 | 20 | 0.02 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB2 | 20 | 0.02 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB3 | 20 | 0.02 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB1 | 20 | 0.02 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB2 | 20 | 0.02 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB3 | 20 | 0.02 |
| (1,53) | 1:A:59:ARG:HG2 | 1:A:58:ILE:H | 10 | 0.02 |
| (1,53) | 1:A:19:ILE:HG13 | 1:A:67:ARG:H | 10 | 0.02 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD11 | 15 | 0.02 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD12 | 15 | 0.02 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD13 | 15 | 0.02 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD11 | 19 | 0.02 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD12 | 19 | 0.02 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD13 | 19 | 0.02 |
| (1,502) | 1:A:19:ILE:HD11 | 1:A:25:ILE:HG13 | 10 | 0.02 |
| (1,502) | 1:A:19:ILE:HD12 | 1:A:25:ILE:HG13 | 10 | 0.02 |
| (1,502) | 1:A:19:ILE:HD13 | 1:A:25:ILE:HG13 | 10 | 0.02 |
| (1,50) | 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:39:LEU:HA | 22 | 0.02 |
| (1,50) | 1:A:16:ILE:HG22 | 1:A:39:LEU:HA | 22 | 0.02 |
| (1,50) | 1:A:16:ILE:HG23 | 1:A:39:LEU:HA | 22 | 0.02 |
| (1,50) | 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:36:LEU:HA | 22 | 0.02 |
| (1,50) | 1:A:16:ILE:HG22 | 1:A:36:LEU:HA | 22 | 0.02 |
| (1,50) | 1:A:16:ILE:HG23 | 1:A:36:LEU:HA | 22 | 0.02 |
| (1,491) | 1:A:27:LEU:HA | 1:A:66:LEU:H | 12 | 0.02 |
| (1,479) | 1:A:23:ALA:HA | 1:A:21:ASP:HA | 11 | 0.02 |
| (1,479) | 1:A:23:ALA:HA | 1:A:21:ASP:HA | 22 | 0.02 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:20:ARG:HB2 | 25 | 0.02 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:20:ARG:HB2 | 25 | 0.02 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:20:ARG:HB2 | 25 | 0.02 |
| (1,47) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:14:ALA:H | 18 | 0.02 |
| (1,47) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:14:ALA:H | 18 | 0.02 |
| (1,47) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:14:ALA:H | 18 | 0.02 |
| (1,47) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:66:LEU:H | 18 | 0.02 |
| (1,47) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:66:LEU:H | 18 | 0.02 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,47) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:66:LEU:H | 18 | 0.02 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD11 | 5 | 0.02 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD12 | 5 | 0.02 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD13 | 5 | 0.02 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD11 | 9 | 0.02 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD12 | 9 | 0.02 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD13 | 9 | 0.02 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD11 | 12 | 0.02 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD12 | 12 | 0.02 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD13 | 12 | 0.02 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD11 | 16 | 0.02 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD12 | 16 | 0.02 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD13 | 16 | 0.02 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD11 | 25 | 0.02 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD12 | 25 | 0.02 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD13 | 25 | 0.02 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD11 | 14 | 0.02 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD12 | 14 | 0.02 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD13 | 14 | 0.02 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD11 | 15 | 0.02 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD12 | 15 | 0.02 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD13 | 15 | 0.02 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD11 | 19 | 0.02 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD12 | 19 | 0.02 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD13 | 19 | 0.02 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD11 | 26 | 0.02 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD12 | 26 | 0.02 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD13 | 26 | 0.02 |
| (1,456) | 1:A:47:ILE:HB | 1:A:50:ARG:H | 8 | 0.02 |
| (1,456) | 1:A:47:ILE:HB | 1:A:50:ARG:H | 22 | 0.02 |
| (1,456) | 1:A:47:ILE:HB | 1:A:50:ARG:H | 30 | 0.02 |
| (1,447) | 1:A:47:ILE:HA | 1:A:51:GLU:HG2 | 24 | 0.02 |
| (1,447) | 1:A:47:ILE:HA | 1:A:51:GLU:HG3 | 24 | 0.02 |
| (1,444) | 1:A:47:ILE:HA | 1:A:50:ARG:HB3 | 16 | 0.02 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:17:LEU:H | 8 | 0.02 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:17:LEU:H | 8 | 0.02 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:17:LEU:H | 8 | 0.02 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:73:SER:H | 8 | 0.02 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:73:SER:H | 8 | 0.02 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:73:SER:H | 8 | 0.02 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:18:GLY:H | 8 | 0.02 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:18:GLY:H | 8 | 0.02 |



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

| (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GLY:H 8 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:61:VAL:HG11 4 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:61:VAL:HG12 4 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG13 4 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG11 4 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG13 4 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:61:VAL:HG11 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:61:VAL:HG13 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG13 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG13 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG13 9 0.02 (1,417) 1:A:46:A:EU:HD21 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,417) 1:A:64:EU:HD21 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:EU:HD21 1:A:63:GLN:HB2 <th>Key</th> <th>Atom-1</th> <th>Atom-2</th> <th>Model</th> <th>Violation (Å)</th> | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|--|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,417) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:61:VAL:HG12 4 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG13 4 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG12 4 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG12 4 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:61:VAL:HG11 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:61:VAL:HG11 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:61:VAL:HG13 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG13 9 0.02 (1,417) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:76:MET:HB2< | (1,43) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:18:GLY:H | 8 | 0.02 |
| (1,417) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:61:VAL:HG13 4 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG11 4 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG12 4 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG13 4 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:61:VAL:HG11 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:61:VAL:HG13 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG13 9 0.02 (1,401) 1:A:64:DEU:HD21 1:A:67:MET:HB2< | (1,417) | 1:A:45:ARG:HD2 | 1:A:61:VAL:HG11 | 4 | 0.02 |
| (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG11 4 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG12 4 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG13 4 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:61:VAL:HG12 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:61:VAL:HG13 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG13 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG12 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG13 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG13 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG13 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG12 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG13 9 0.02 (1,400) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:67:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD22 1:A:63:GLN:HB2< | (1,417) | 1:A:45:ARG:HD2 | 1:A:61:VAL:HG12 | 4 | 0.02 |
| (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG12 4 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:61:VAL:HG13 4 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:61:VAL:HG11 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:61:VAL:HG12 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG13 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG12 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG12 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG13 9 0.02 (1,400) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:72:MET:HB2< | (1,417) | 1:A:45:ARG:HD2 | 1:A:61:VAL:HG13 | 4 | 0.02 |
| (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG13 4 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:61:VAL:HG11 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:61:VAL:HG12 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG13 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG12 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG13 9 0.02 (1,401) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:72:MET:HB2< | (1,417) | 1:A:45:ARG:HD3 | 1:A:61:VAL:HG11 | 4 | 0.02 |
| (1,417) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:61:VAL:HG11 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:61:VAL:HG12 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:61:VAL:HG13 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG11 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG12 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG13 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG13 9 0.02 (1,401) 1:A:46:LEU:HD21 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD22 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2< | (1,417) | 1:A:45:ARG:HD3 | 1:A:61:VAL:HG12 | 4 | 0.02 |
| (1,417) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:61:VAL:HG12 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:61:VAL:HG13 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG11 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG11 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG12 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG13 9 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 40 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 1 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 1 0.02 (1,373) 1:A | (1,417) | 1:A:45:ARG:HD3 | 1:A:61:VAL:HG13 | 4 | 0.02 |
| (1,417) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:61:VAL:HG13 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG11 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG12 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG13 9 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD22 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 </td <td>(1,417)</td> <td>1:A:45:ARG:HD2</td> <td>1:A:61:VAL:HG11</td> <td>9</td> <td>0.02</td> | (1,417) | 1:A:45:ARG:HD2 | 1:A:61:VAL:HG11 | 9 | 0.02 |
| (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG11 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG12 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG13 9 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD22 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 </td <td>(1,417)</td> <td>1:A:45:ARG:HD2</td> <td>1:A:61:VAL:HG12</td> <td>9</td> <td>0.02</td> | (1,417) | 1:A:45:ARG:HD2 | 1:A:61:VAL:HG12 | 9 | 0.02 |
| (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG12 9 0.02 (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG13 9 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD22 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD22 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA </td <td>(1,417)</td> <td>1:A:45:ARG:HD2</td> <td>1:A:61:VAL:HG13</td> <td>9</td> <td>0.02</td> | (1,417) | 1:A:45:ARG:HD2 | 1:A:61:VAL:HG13 | 9 | 0.02 |
| (1,417) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:61:VAL:HG13 9 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD22 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD22 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA <td>(1,417)</td> <td>1:A:45:ARG:HD3</td> <td>1:A:61:VAL:HG11</td> <td>9</td> <td>0.02</td> | (1,417) | 1:A:45:ARG:HD3 | 1:A:61:VAL:HG11 | 9 | 0.02 |
| (1,40) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD22 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD22 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA <td>(1,417)</td> <td>1:A:45:ARG:HD3</td> <td>1:A:61:VAL:HG12</td> <td>9</td> <td>0.02</td> | (1,417) | 1:A:45:ARG:HD3 | 1:A:61:VAL:HG12 | 9 | 0.02 |
| (1,40) 1:A:64:LEU:HD22 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD22 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA <td>(1,417)</td> <td>1:A:45:ARG:HD3</td> <td>1:A:61:VAL:HG13</td> <td>9</td> <td>0.02</td> | (1,417) | 1:A:45:ARG:HD3 | 1:A:61:VAL:HG13 | 9 | 0.02 |
| (1,40) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD22 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA <td>(1,40)</td> <td>1:A:64:LEU:HD21</td> <td>1:A:72:MET:HB2</td> <td>24</td> <td>0.02</td> | (1,40) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:72:MET:HB2 | 24 | 0.02 |
| (1,40) 1:A:64:LEU:HD21 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD22 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA <td>(1,40)</td> <td>1:A:64:LEU:HD22</td> <td>1:A:72:MET:HB2</td> <td>24</td> <td>0.02</td> | (1,40) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:72:MET:HB2 | 24 | 0.02 |
| (1,40) 1:A:64:LEU:HD22 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1: | (1,40) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:72:MET:HB2 | 24 | 0.02 |
| (1,40) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA <td>(1,40)</td> <td>1:A:64:LEU:HD21</td> <td>1:A:63:GLN:HB2</td> <td>24</td> <td>0.02</td> | (1,40) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:63:GLN:HB2 | 24 | 0.02 |
| (1,40) 1:A:64:LEU:HD23 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA </td <td>· ' /</td> <td>1:A:64:LEU:HD22</td> <td>1:A:63:GLN:HB2</td> <td>24</td> <td>0.02</td> | · ' / | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:63:GLN:HB2 | 24 | 0.02 |
| (1,40) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,381) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA | , , | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:63:GLN:HB2 | 24 | 0.02 |
| (1,40) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:72:MET:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,381) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA | (1,40) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:72:MET:HB2 | 24 | 0.02 |
| (1,40) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,381) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA | (1,40) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:72:MET:HB2 | 24 | 0.02 |
| (1,40) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,374) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 9 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H | (1,40) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:72:MET:HB2 | 24 | 0.02 |
| (1,40) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:GLN:HB2 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,374) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 9 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H | (1,40) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:63:GLN:HB2 | 24 | 0.02 |
| (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,381) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,374) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 9 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 7 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H < | (1,40) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:63:GLN:HB2 | 24 | 0.02 |
| (1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,374) 1:A:19:ILE:HB 1:A:18:GLY:H 9 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 7 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 9 0.02 | (1,40) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:63:GLN:HB2 | 24 | 0.02 |
| (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 4 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,374) 1:A:19:ILE:HB 1:A:18:GLY:H 9 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 7 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 9 0.02 | (1,391) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:21:ASP:HA | 4 | 0.02 |
| (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 9 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 7 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 7 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 9 0.02 | (1,391) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:21:ASP:HA | 4 | 0.02 |
| (1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,374) 1:A:19:ILE:HB 1:A:18:GLY:H 9 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 1 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 7 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 9 0.02 | (1,391) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:21:ASP:HA | 4 | 0.02 |
| (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 24 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:19:ILE:HB 1:A:18:GLY:H 9 0.02 (1,374) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 1 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 7 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 9 0.02 | (1,391) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:21:ASP:HA | 24 | 0.02 |
| (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,374) 1:A:19:ILE:HB 1:A:18:GLY:H 9 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 1 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 7 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 9 0.02 | (1,391) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:21:ASP:HA | 24 | 0.02 |
| (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,374) 1:A:19:ILE:HB 1:A:18:GLY:H 9 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 1 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 7 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 9 0.02 | (1,391) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:21:ASP:HA | 24 | 0.02 |
| (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,374) 1:A:19:ILE:HB 1:A:18:GLY:H 9 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 1 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 7 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 9 0.02 | (1,38) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:32:ALA:HA | 6 | 0.02 |
| (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,374) 1:A:19:ILE:HB 1:A:18:GLY:H 9 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 1 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 7 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 9 0.02 | | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:32:ALA:HA | 6 | 0.02 |
| (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,374) 1:A:19:ILE:HB 1:A:18:GLY:H 9 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 1 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 7 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 9 0.02 | | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:32:ALA:HA | 6 | 0.02 |
| (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,374) 1:A:19:ILE:HB 1:A:18:GLY:H 9 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 1 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 7 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 9 0.02 | | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:50:ARG:HA | 6 | 0.02 |
| (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 6 0.02 (1,374) 1:A:19:ILE:HB 1:A:18:GLY:H 9 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 1 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 7 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 9 0.02 | | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:50:ARG:HA | 6 | 0.02 |
| (1,374) 1:A:19:ILE:HB 1:A:18:GLY:H 9 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 1 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 7 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 9 0.02 | . , | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:50:ARG:HA | 6 | 0.02 |
| (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 1 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 7 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 9 0.02 | | 1:A:19:ILE:HB | 1:A:18:GLY:H | 9 | 0.02 |
| (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 7 0.02 (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 9 0.02 | | 1:A:19:ILE:HB | 1:A:19:ILE:H | 1 | 0.02 |
| (1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 9 0.02 | | 1:A:19:ILE:HB | 1:A:19:ILE:H | 7 | 0.02 |
| | · · / | 1:A:19:ILE:HB | 1:A:19:ILE:H | 9 | 0.02 |
| (1,0,0) 1,11,10,11111111 1,11,10,11111111 10 0.02 | (1,373) | 1:A:19:ILE:HB | 1:A:19:ILE:H | 13 | 0.02 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,373) | 1:A:19:ILE:HB | 1:A:19:ILE:H | 16 | 0.02 |
| (1,373) | 1:A:19:ILE:HB | 1:A:19:ILE:H | 19 | 0.02 |
| (1,373) | 1:A:19:ILE:HB | 1:A:19:ILE:H | 22 | 0.02 |
| (1,373) | 1:A:19:ILE:HB | 1:A:19:ILE:H | 28 | 0.02 |
| (1,373) | 1:A:19:ILE:HB | 1:A:19:ILE:H | 30 | 0.02 |
| (1,366) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:16:ILE:HG21 | 7 | 0.02 |
| (1,366) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:16:ILE:HG22 | 7 | 0.02 |
| (1,366) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:16:ILE:HG23 | 7 | 0.02 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG21 | 1 | 0.02 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG22 | 1 | 0.02 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG23 | 1 | 0.02 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG21 | 4 | 0.02 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG22 | 4 | 0.02 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG23 | 4 | 0.02 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG21 | 8 | 0.02 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG22 | 8 | 0.02 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG23 | 8 | 0.02 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG21 | 12 | 0.02 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG22 | 12 | 0.02 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG23 | 12 | 0.02 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG21 | 17 | 0.02 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG22 | 17 | 0.02 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG23 | 17 | 0.02 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG21 | 23 | 0.02 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG22 | 23 | 0.02 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG23 | 23 | 0.02 |
| (1,360) | 1:A:17:LEU:HA | 1:A:19:ILE:HG21 | 14 | 0.02 |
| (1,360) | 1:A:17:LEU:HA | 1:A:19:ILE:HG22 | 14 | 0.02 |
| (1,360) | 1:A:17:LEU:HA | 1:A:19:ILE:HG23 | 14 | 0.02 |
| (1,360) | 1:A:17:LEU:HA | 1:A:19:ILE:HG21 | 16 | 0.02 |
| (1,360) | 1:A:17:LEU:HA | 1:A:19:ILE:HG22 | 16 | 0.02 |
| (1,360) | 1:A:17:LEU:HA | 1:A:19:ILE:HG23 | 16 | 0.02 |
| (1,360) | 1:A:17:LEU:HA | 1:A:19:ILE:HG21 | 19 | 0.02 |
| (1,360) | 1:A:17:LEU:HA | 1:A:19:ILE:HG22 | 19 | 0.02 |
| (1,360) | 1:A:17:LEU:HA | 1:A:19:ILE:HG23 | 19 | 0.02 |
| (1,319) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:48:LEU:H | 11 | 0.02 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 3 | 0.02 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 3 | 0.02 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 3 | 0.02 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 26 | 0.02 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 26 | 0.02 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 26 | 0.02 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 29 | 0.02 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 29 | 0.02 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 29 | 0.02 |
| (1,306) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:38:SER:H | 10 | 0.02 |
| (1,303) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:37:ASP:H | 16 | 0.02 |
| (1,297) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:16:ILE:HA | 23 | 0.02 |
| (1,297) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:16:ILE:HA | 23 | 0.02 |
| (1,297) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:16:ILE:HA | 23 | 0.02 |
| (1,297) | 1:A:17:LEU:HD21 | 1:A:16:ILE:HA | 23 | 0.02 |
| (1,297) | 1:A:17:LEU:HD22 | 1:A:16:ILE:HA | 23 | 0.02 |
| (1,297) | 1:A:17:LEU:HD23 | 1:A:16:ILE:HA | 23 | 0.02 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 9 | 0.02 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 9 | 0.02 |
| (1,264) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 9 | 0.02 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HG | 7 | 0.02 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HG | 7 | 0.02 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HG | 7 | 0.02 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HG | 11 | 0.02 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HG | 11 | 0.02 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HG | 11 | 0.02 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HG | 28 | 0.02 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HG | 28 | 0.02 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HG | 28 | 0.02 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 1 | 0.02 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 1 | 0.02 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 1 | 0.02 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:62:ARG:HG3 | 11 | 0.02 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:62:ARG:HG3 | 11 | 0.02 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:62:ARG:HG3 | 11 | 0.02 |
| (1,229) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD21 | 2 | 0.02 |
| (1,229) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD22 | 2 | 0.02 |
| (1,229) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD23 | 2 | 0.02 |
| (1,201) | 1:A:29:SER:HB2 | 1:A:30:SER:H | 27 | 0.02 |
| (1,195) | 1:A:29:SER:HB2 | 1:A:34:LEU:HG | 28 | 0.02 |
| (1,194) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HG | 5 | 0.02 |
| (1,194) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HG | 24 | 0.02 |
| (1,193) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD11 | 9 | 0.02 |
| (1,193) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD12 | 9 | 0.02 |
| (1,193) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD13 | 9 | 0.02 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:74:SER:H | 26 | 0.02 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:69:LEU:H | 26 | 0.02 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 4 | 0.02 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 4 | 0.02 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 4 | 0.02 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 9 | 0.02 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 9 | 0.02 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 9 | 0.02 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:24:GLY:HA2 | 11 | 0.02 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:24:GLY:HA2 | 11 | 0.02 |
| (1,177) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:24:GLY:HA2 | 11 | 0.02 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG21 | 16 | 0.02 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG22 | 16 | 0.02 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG23 | 16 | 0.02 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG21 | 19 | 0.02 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG22 | 19 | 0.02 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG23 | 19 | 0.02 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG21 | 21 | 0.02 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG22 | 21 | 0.02 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG23 | 21 | 0.02 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG21 | 24 | 0.02 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG22 | 24 | 0.02 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG23 | 24 | 0.02 |
| (1,1731) | 1:A:4:GLU:H | 1:A:3:GLY:H | 20 | 0.02 |
| (1,1726) | 1:A:80:THR:H | 1:A:81:GLU:H | 9 | 0.02 |
| (1,1726) | 1:A:80:THR:H | 1:A:81:GLU:H | 10 | 0.02 |
| (1,1725) | 1:A:80:THR:H | 1:A:79:ASP:H | 10 | 0.02 |
| (1,1715) | 1:A:67:ARG:H | 1:A:67:ARG:HE | 9 | 0.02 |
| (1,1710) | 1:A:63:GLN:H | 1:A:64:LEU:H | 2 | 0.02 |
| (1,1710) | 1:A:63:GLN:H | 1:A:64:LEU:H | 10 | 0.02 |
| (1,1710) | 1:A:63:GLN:H | 1:A:64:LEU:H | 15 | 0.02 |
| (1,171) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:21:ASP:HA | 6 | 0.02 |
| (1,171) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:21:ASP:HA | 8 | 0.02 |
| (1,171) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:21:ASP:HA | 10 | 0.02 |
| (1,1701) | 1:A:47:ILE:H | 1:A:48:LEU:H | 20 | 0.02 |
| (1,1675) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:ARG:H | 7 | 0.02 |
| (1,1654) | 1:A:29:SER:H | 1:A:28:ASP:H | 10 | 0.02 |
| (1,1648) | 1:A:74:SER:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 30 | 0.02 |
| (1,1648) | 1:A:74:SER:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 30 | 0.02 |
| (1,1648) | 1:A:74:SER:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 30 | 0.02 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG21 | 16 | 0.02 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG22 | 16 | 0.02 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG23 | 16 | 0.02 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG21 | 20 | 0.02 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG22 | 20 | 0.02 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG23 | 20 | 0.02 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG21 | 27 | 0.02 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG22 | 27 | 0.02 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG23 | 27 | 0.02 |
| (1,1630) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:10:VAL:HG21 | 19 | 0.02 |
| (1,1630) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:10:VAL:HG22 | 19 | 0.02 |
| (1,1630) | 1:A:73:SER:HB3 | 1:A:10:VAL:HG23 | 19 | 0.02 |
| (1,1624) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:57:PRO:HD2 | 11 | 0.02 |
| (1,1624) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:57:PRO:HD2 | 11 | 0.02 |
| (1,1624) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:57:PRO:HD2 | 11 | 0.02 |
| (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 7 | 0.02 |
| (1,1618) | 1:A:58:ILE:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 7 | 0.02 |
| (1,1600) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:40:MET:HG3 | 11 | 0.02 |
| (1,1600) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:40:MET:HG3 | 11 | 0.02 |
| (1,1600) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:40:MET:HG3 | 11 | 0.02 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:9:LEU:HD21 | 15 | 0.02 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:9:LEU:HD22 | 15 | 0.02 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:9:LEU:HD23 | 15 | 0.02 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:9:LEU:HD21 | 15 | 0.02 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:9:LEU:HD22 | 15 | 0.02 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:9:LEU:HD23 | 15 | 0.02 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:9:LEU:HD21 | 29 | 0.02 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:9:LEU:HD22 | 29 | 0.02 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:9:LEU:HD23 | 29 | 0.02 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:9:LEU:HD21 | 29 | 0.02 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:9:LEU:HD22 | 29 | 0.02 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:9:LEU:HD23 | 29 | 0.02 |
| (1,1597) | 1:A:27:LEU:HB2 | 1:A:27:LEU:H | 12 | 0.02 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:29:SER:HA | 10 | 0.02 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:29:SER:HA | 10 | 0.02 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:29:SER:HA | 10 | 0.02 |
| (1,1589) | 1:A:20:ARG:HG3 | 1:A:67:ARG:HE | 22 | 0.02 |
| (1,1588) | 1:A:7:ARG:HG2 | 1:A:12:ALA:H | 20 | 0.02 |
| (1,1588) | 1:A:7:ARG:HG3 | 1:A:12:ALA:H | 20 | 0.02 |
| (1,1587) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:75:LYS:HE2 | 6 | 0.02 |
| (1,1587) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:75:LYS:HE3 | 6 | 0.02 |
| (1,1587) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:75:LYS:HE2 | 18 | 0.02 |
| (1,1587) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:75:LYS:HE3 | 18 | 0.02 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG2 | 1:A:75:LYS:HE2 | 11 | 0.02 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG2 | 1:A:75:LYS:HE3 | 11 | 0.02 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG3 | 1:A:75:LYS:HE2 | 11 | 0.02 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG3 | 1:A:75:LYS:HE3 | 11 | 0.02 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|-------|---------------|
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG2 | 1:A:75:LYS:HE2 | 12 | 0.02 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG2 | 1:A:75:LYS:HE3 | 12 | 0.02 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG3 | 1:A:75:LYS:HE2 | 12 | 0.02 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG3 | 1:A:75:LYS:HE3 | 12 | 0.02 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG2 | 1:A:75:LYS:HE2 | 13 | 0.02 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG2 | 1:A:75:LYS:HE3 | 13 | 0.02 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG3 | 1:A:75:LYS:HE2 | 13 | 0.02 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG3 | 1:A:75:LYS:HE3 | 13 | 0.02 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG2 | 1:A:75:LYS:HE2 | 28 | 0.02 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG2 | 1:A:75:LYS:HE3 | 28 | 0.02 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG3 | 1:A:75:LYS:HE2 | 28 | 0.02 |
| (1,1586) | 1:A:7:ARG:HG3 | 1:A:75:LYS:HE3 | 28 | 0.02 |
| (1,1584) | 1:A:59:ARG:HG3 | 1:A:58:ILE:H | 24 | 0.02 |
| (1,1578) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:22:LEU:HA | 14 | 0.02 |
| (1,1578) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:22:LEU:HA | 14 | 0.02 |
| (1,1578) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:22:LEU:HA | 14 | 0.02 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:65:THR:HA | 4 | 0.02 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:65:THR:HA | 4 | 0.02 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:65:THR:HA | 4 | 0.02 |
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:13:VAL:H | 20 | 0.02 |
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:13:VAL:H | 20 | 0.02 |
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:13:VAL:H | 20 | 0.02 |
| (1,1574) | 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:40:MET:HG2 | 27 | 0.02 |
| (1,1574) | 1:A:16:ILE:HG22 | 1:A:40:MET:HG2 | 27 | 0.02 |
| (1,1574) | 1:A:16:ILE:HG23 | 1:A:40:MET:HG2 | 27 | 0.02 |
| (1,1567) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:57:PRO:HB3 | 1 | 0.02 |
| (1,1567) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:57:PRO:HB3 | 1 | 0.02 |
| (1,1567) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:57:PRO:HB3 | 1 | 0.02 |
| (1,1555) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:HB3 | 26 | 0.02 |
| (1,1555) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:HB3 | 26 | 0.02 |
| (1,1555) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:HB3 | 26 | 0.02 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:26:ASN:HB3 | 22 | 0.02 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:26:ASN:HB3 | 22 | 0.02 |
| (1,1554) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:26:ASN:HB3 | 22 | 0.02 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:26:ASN:H | 1 | 0.02 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:26:ASN:H | 1 | 0.02 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:26:ASN:H | 1 | 0.02 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:26:ASN:H | 10 | 0.02 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:26:ASN:H | 10 | 0.02 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:26:ASN:H | 10 | 0.02 |
| (1,1551) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:17:LEU:H | 16 | 0.02 |
| (1,1551) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:17:LEU:H | 16 | 0.02 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|-------|---------------|
| (1,1551) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:17:LEU:H | 16 | 0.02 |
| (1,1551) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:17:LEU:H | 17 | 0.02 |
| (1,1551) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:17:LEU:H | 17 | 0.02 |
| (1,1551) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:17:LEU:H | 17 | 0.02 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:40:MET:HA | 5 | 0.02 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:40:MET:HA | 5 | 0.02 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:40:MET:HA | 5 | 0.02 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:42:VAL:HA | 6 | 0.02 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:42:VAL:HA | 6 | 0.02 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:42:VAL:HA | 6 | 0.02 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:42:VAL:HA | 13 | 0.02 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:42:VAL:HA | 13 | 0.02 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:42:VAL:HA | 13 | 0.02 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:42:VAL:HA | 20 | 0.02 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:42:VAL:HA | 20 | 0.02 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:42:VAL:HA | 20 | 0.02 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:42:VAL:HA | 26 | 0.02 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:42:VAL:HA | 26 | 0.02 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:42:VAL:HA | 26 | 0.02 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG21 | 1:A:45:ARG:HE | 26 | 0.02 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG22 | 1:A:45:ARG:HE | 26 | 0.02 |
| (1,1545) | 1:A:44:VAL:HG23 | 1:A:45:ARG:HE | 26 | 0.02 |
| (1,1531) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:72:MET:H | 5 | 0.02 |
| (1,1531) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:72:MET:H | 5 | 0.02 |
| (1,1531) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:72:MET:H | 5 | 0.02 |
| (1,1531) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:72:MET:H | 13 | 0.02 |
| (1,1531) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:72:MET:H | 13 | 0.02 |
| (1,1531) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:72:MET:H | 13 | 0.02 |
| (1,1523) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:70:GLN:H | 11 | 0.02 |
| (1,1523) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:70:GLN:H | 29 | 0.02 |
| (1,1517) | 1:A:8:ASP:HB3 | 1:A:7:ARG:HA | 19 | 0.02 |
| (1,1508) | 1:A:72:MET:HG3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 16 | 0.02 |
| (1,1508) | 1:A:72:MET:HG3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 16 | 0.02 |
| (1,1508) | 1:A:72:MET:HG3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 16 | 0.02 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD2 | 2 | 0.02 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD3 | 2 | 0.02 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 2 | 0.02 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 2 | 0.02 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD2 | 2 | 0.02 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD3 | 2 | 0.02 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD2 | 10 | 0.02 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD3 | 10 | 0.02 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|-------|---------------|
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 10 | 0.02 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 10 | 0.02 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD2 | 10 | 0.02 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD3 | 10 | 0.02 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD2 | 26 | 0.02 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD3 | 26 | 0.02 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 26 | 0.02 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 26 | 0.02 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD2 | 26 | 0.02 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD3 | 26 | 0.02 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD2 | 28 | 0.02 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD3 | 28 | 0.02 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 28 | 0.02 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 28 | 0.02 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD2 | 28 | 0.02 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD3 | 28 | 0.02 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD2 | 30 | 0.02 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:59:ARG:HD3 | 30 | 0.02 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD2 | 30 | 0.02 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:59:ARG:HD3 | 30 | 0.02 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD2 | 30 | 0.02 |
| (1,1505) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:59:ARG:HD3 | 30 | 0.02 |
| (1,1503) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:49:GLU:H | 14 | 0.02 |
| (1,1503) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:49:GLU:H | 14 | 0.02 |
| (1,1503) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:49:GLU:H | 14 | 0.02 |
| (1,1501) | 1:A:49:GLU:HA | 1:A:53:ASP:HB3 | 5 | 0.02 |
| (1,1498) | 1:A:67:ARG:HD2 | 1:A:69:LEU:H | 10 | 0.02 |
| (1,1498) | 1:A:67:ARG:HD2 | 1:A:69:LEU:H | 21 | 0.02 |
| (1,1498) | 1:A:67:ARG:HD2 | 1:A:69:LEU:H | 24 | 0.02 |
| (1,1498) | 1:A:67:ARG:HD2 | 1:A:69:LEU:H | 26 | 0.02 |
| (1,1497) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:63:GLN:HB2 | 12 | 0.02 |
| (1,1497) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:63:GLN:HB2 | 12 | 0.02 |
| (1,1497) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:63:GLN:HB2 | 12 | 0.02 |
| (1,1493) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:50:ARG:HD2 | 17 | 0.02 |
| (1,1493) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:50:ARG:HD3 | 17 | 0.02 |
| (1,1493) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:50:ARG:HD2 | 21 | 0.02 |
| (1,1493) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:50:ARG:HD3 | 21 | 0.02 |
| (1,1493) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:50:ARG:HD2 | 24 | 0.02 |
| (1,1493) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:50:ARG:HD3 | 24 | 0.02 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:46:GLN:HG2 | 25 | 0.02 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:46:GLN:HG2 | 25 | 0.02 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:46:GLN:HG2 | 25 | 0.02 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:46:GLN:HG2 | 29 | 0.02 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:46:GLN:HG2 | 29 | 0.02 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:46:GLN:HG2 | 29 | 0.02 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:19:ILE:HB | 17 | 0.02 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:19:ILE:HB | 17 | 0.02 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:19:ILE:HB | 17 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG11 | 8 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG12 | 8 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG13 | 8 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG11 | 8 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG12 | 8 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG13 | 8 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG11 | 8 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG12 | 8 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG13 | 8 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG11 | 16 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG12 | 16 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG13 | 16 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG11 | 16 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG12 | 16 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG13 | 16 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG11 | 16 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG12 | 16 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG13 | 16 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG11 | 18 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG12 | 18 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG13 | 18 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG11 | 18 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG12 | 18 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG13 | 18 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG11 | 18 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG12 | 18 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG13 | 18 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG11 | 20 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG12 | 20 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG13 | 20 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG11 | 20 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG12 | 20 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG13 | 20 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG11 | 20 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG12 | 20 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG13 | 20 | 0.02 |



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

| Key | $\frac{\text{4 from previous page.}}{\text{Atom-1}}$ | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|--|-----------------|-------|---------------|
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG11 | 24 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG12 | 24 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG13 | 24 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG11 | 24 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG12 | 24 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG13 | 24 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG11 | 24 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG12 | 24 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG13 | 24 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG11 | 27 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG12 | 27 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG13 | 27 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG11 | 27 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG12 | 27 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG13 | 27 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG11 | 27 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG12 | 27 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG13 | 27 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG11 | 28 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG12 | 28 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG13 | 28 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG11 | 28 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG12 | 28 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG13 | 28 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG11 | 28 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG12 | 28 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG13 | 28 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG11 | 30 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG12 | 30 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG13 | 30 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG11 | 30 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG12 | 30 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG13 | 30 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG11 | 30 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG12 | 30 | 0.02 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG13 | 30 | 0.02 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG11 | 13 | 0.02 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG12 | 13 | 0.02 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG13 | 13 | 0.02 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG11 | 17 | 0.02 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG12 | 17 | 0.02 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG13 | 17 | 0.02 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG11 | 18 | 0.02 |
| | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG12 | 18 | 0.02 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG13 | 18 | 0.02 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG11 | 19 | 0.02 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG12 | 19 | 0.02 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG13 | 19 | 0.02 |
| (1,1447) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:17:LEU:HG | 3 | 0.02 |
| (1,1447) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:17:LEU:HG | 3 | 0.02 |
| (1,1447) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:17:LEU:HG | 3 | 0.02 |
| (1,1447) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:17:LEU:HG | 24 | 0.02 |
| (1,1447) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:17:LEU:HG | 24 | 0.02 |
| (1,1447) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:17:LEU:HG | 24 | 0.02 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:47:ILE:HG13 | 4 | 0.02 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:47:ILE:HG13 | 4 | 0.02 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:47:ILE:HG13 | 4 | 0.02 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:47:ILE:HG13 | 11 | 0.02 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:47:ILE:HG13 | 11 | 0.02 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:47:ILE:HG13 | 11 | 0.02 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:47:ILE:HG13 | 14 | 0.02 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:47:ILE:HG13 | 14 | 0.02 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:47:ILE:HG13 | 14 | 0.02 |
| (1,1435) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:9:LEU:HA | 20 | 0.02 |
| (1,1435) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:9:LEU:HA | 20 | 0.02 |
| (1,1435) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:9:LEU:HA | 20 | 0.02 |
| (1,1435) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:9:LEU:HA | 29 | 0.02 |
| (1,1435) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:9:LEU:HA | 29 | 0.02 |
| (1,1435) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:9:LEU:HA | 29 | 0.02 |
| (1,1429) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:39:LEU:H | 13 | 0.02 |
| (1,1429) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:39:LEU:H | 13 | 0.02 |
| (1,1429) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:39:LEU:H | 13 | 0.02 |
| (1,1423) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:39:LEU:HG | 17 | 0.02 |
| (1,1423) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:39:LEU:HG | 17 | 0.02 |
| (1,1423) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:39:LEU:HG | 17 | 0.02 |
| (1,1423) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:39:LEU:HG | 20 | 0.02 |
| (1,1423) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:39:LEU:HG | 20 | 0.02 |
| (1,1423) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:39:LEU:HG | 20 | 0.02 |
| (1,1423) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:39:LEU:HG | 30 | 0.02 |
| (1,1423) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:39:LEU:HG | 30 | 0.02 |
| (1,1423) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:39:LEU:HG | 30 | 0.02 |
| (1,1411) | 1:A:42:VAL:HG11 | 1:A:43:GLU:HG3 | 1 | 0.02 |
| (1,1411) | 1:A:42:VAL:HG12 | 1:A:43:GLU:HG3 | 1 | 0.02 |
| (1,1411) | 1:A:42:VAL:HG13 | 1:A:43:GLU:HG3 | 1 | 0.02 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1411) | 1:A:42:VAL:HG11 | 1:A:43:GLU:HG3 | 13 | 0.02 |
| (1,1411) | 1:A:42:VAL:HG12 | 1:A:43:GLU:HG3 | 13 | 0.02 |
| (1,1411) | 1:A:42:VAL:HG13 | 1:A:43:GLU:HG3 | 13 | 0.02 |
| (1,1407) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:44:VAL:H | 25 | 0.02 |
| (1,1402) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:ARG:HB3 | 12 | 0.02 |
| (1,1402) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:ARG:HB3 | 13 | 0.02 |
| (1,1402) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:ARG:HB3 | 26 | 0.02 |
| (1,1378) | 1:A:12:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HA | 16 | 0.02 |
| (1,1378) | 1:A:12:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HA | 16 | 0.02 |
| (1,1378) | 1:A:12:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HA | 16 | 0.02 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HB2 | 14 | 0.02 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 14 | 0.02 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:68:LYS:HB2 | 14 | 0.02 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:68:LYS:HB3 | 14 | 0.02 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HB2 | 15 | 0.02 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 15 | 0.02 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:68:LYS:HB2 | 15 | 0.02 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:68:LYS:HB3 | 15 | 0.02 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HB2 | 26 | 0.02 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 26 | 0.02 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:68:LYS:HB2 | 26 | 0.02 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:68:LYS:HB3 | 26 | 0.02 |
| (1,1325) | 1:A:67:ARG:HD2 | 1:A:67:ARG:HA | 9 | 0.02 |
| (1,1311) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:68:LYS:HD2 | 2 | 0.02 |
| (1,1311) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:68:LYS:HD3 | 2 | 0.02 |
| (1,1311) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:68:LYS:HD2 | 20 | 0.02 |
| (1,1311) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:68:LYS:HD3 | 20 | 0.02 |
| (1,1311) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:68:LYS:HD2 | 21 | 0.02 |
| (1,1311) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:68:LYS:HD3 | 21 | 0.02 |
| (1,1308) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:63:GLN:HE21 | 1 | 0.02 |
| (1,1308) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:63:GLN:HE21 | 5 | 0.02 |
| (1,1308) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:63:GLN:HE21 | 25 | 0.02 |
| (1,1308) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:63:GLN:HE21 | 30 | 0.02 |
| (1,1296) | 1:A:63:GLN:HA | 1:A:32:ALA:HB1 | 29 | 0.02 |
| (1,1296) | 1:A:63:GLN:HA | 1:A:32:ALA:HB2 | 29 | 0.02 |
| (1,1296) | 1:A:63:GLN:HA | 1:A:32:ALA:HB3 | 29 | 0.02 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB1 | 8 | 0.02 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB2 | 8 | 0.02 |
| (1,1276) | 1:A:62:ARG:HB3 | 1:A:32:ALA:HB3 | 8 | 0.02 |
| (1,1267) | 1:A:61:VAL:HG21 | 1:A:60:GLU:HB3 | 20 | 0.02 |
| (1,1267) | 1:A:61:VAL:HG22 | 1:A:60:GLU:HB3 | 20 | 0.02 |
| (1,1267) | 1:A:61:VAL:HG23 | 1:A:60:GLU:HB3 | 20 | 0.02 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1267) | 1:A:61:VAL:HG21 | 1:A:60:GLU:HB3 | 24 | 0.02 |
| (1,1267) | 1:A:61:VAL:HG22 | 1:A:60:GLU:HB3 | 24 | 0.02 |
| (1,1267) | 1:A:61:VAL:HG23 | 1:A:60:GLU:HB3 | 24 | 0.02 |
| (1,1252) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:63:GLN:HE22 | 17 | 0.02 |
| (1,1252) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:63:GLN:HE22 | 18 | 0.02 |
| (1,1252) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:63:GLN:HE22 | 22 | 0.02 |
| (1,1252) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:63:GLN:HE22 | 23 | 0.02 |
| (1,1246) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:64:LEU:HG | 2 | 0.02 |
| (1,1239) | 1:A:60:GLU:HB3 | 1:A:56:LEU:HB2 | 3 | 0.02 |
| (1,1239) | 1:A:60:GLU:HB3 | 1:A:56:LEU:HB2 | 25 | 0.02 |
| (1,1222) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:63:GLN:HE22 | 6 | 0.02 |
| (1,1222) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:63:GLN:HE22 | 6 | 0.02 |
| (1,1222) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:63:GLN:HE22 | 6 | 0.02 |
| (1,1222) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:63:GLN:HE22 | 22 | 0.02 |
| (1,1222) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:63:GLN:HE22 | 22 | 0.02 |
| (1,1222) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:63:GLN:HE22 | 22 | 0.02 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:57:PRO:HB3 | 19 | 0.02 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:57:PRO:HB3 | 19 | 0.02 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:57:PRO:HB3 | 19 | 0.02 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:57:PRO:HB3 | 30 | 0.02 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:57:PRO:HB3 | 30 | 0.02 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:57:PRO:HB3 | 30 | 0.02 |
| (1,1219) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:59:ARG:HD2 | 9 | 0.02 |
| (1,1219) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:59:ARG:HD3 | 9 | 0.02 |
| (1,1219) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:59:ARG:HD2 | 9 | 0.02 |
| (1,1219) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:59:ARG:HD3 | 9 | 0.02 |
| (1,1219) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:59:ARG:HD2 | 9 | 0.02 |
| (1,1219) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:59:ARG:HD3 | 9 | 0.02 |
| (1,1219) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:59:ARG:HD2 | 14 | 0.02 |
| (1,1219) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:59:ARG:HD3 | 14 | 0.02 |
| (1,1219) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:59:ARG:HD2 | 14 | 0.02 |
| (1,1219) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:59:ARG:HD3 | 14 | 0.02 |
| (1,1219) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:59:ARG:HD2 | 14 | 0.02 |
| (1,1219) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:59:ARG:HD3 | 14 | 0.02 |
| (1,12) | 1:A:41:GLY:HA2 | 1:A:61:VAL:HG11 | 8 | 0.02 |
| (1,12) | 1:A:41:GLY:HA2 | 1:A:61:VAL:HG12 | 8 | 0.02 |
| (1,12) | 1:A:41:GLY:HA2 | 1:A:61:VAL:HG13 | 8 | 0.02 |
| (1,12) | 1:A:41:GLY:HA2 | 1:A:58:ILE:HD11 | 8 | 0.02 |
| (1,12) | 1:A:41:GLY:HA2 | 1:A:58:ILE:HD12 | 8 | 0.02 |
| (1,12) | 1:A:41:GLY:HA2 | 1:A:58:ILE:HD13 | 8 | 0.02 |
| (1,12) | 1:A:41:GLY:HA2 | 1:A:64:LEU:HD11 | 8 | 0.02 |
| (1,12) | 1:A:41:GLY:HA2 | 1:A:64:LEU:HD12 | 8 | 0.02 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,12) | 1:A:41:GLY:HA2 | 1:A:64:LEU:HD13 | 8 | 0.02 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HB2 | 5 | 0.02 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HG2 | 5 | 0.02 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HB2 | 16 | 0.02 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HG2 | 16 | 0.02 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HB2 | 23 | 0.02 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HG2 | 23 | 0.02 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HB2 | 25 | 0.02 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HG2 | 25 | 0.02 |
| (1,1172) | 1:A:55:VAL:HA | 1:A:57:PRO:HG3 | 16 | 0.02 |
| (1,1172) | 1:A:55:VAL:HA | 1:A:57:PRO:HG3 | 23 | 0.02 |
| (1,1172) | 1:A:55:VAL:HA | 1:A:57:PRO:HG3 | 28 | 0.02 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD21 | 16 | 0.02 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD22 | 16 | 0.02 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD23 | 16 | 0.02 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD21 | 23 | 0.02 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD22 | 23 | 0.02 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD23 | 23 | 0.02 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:51:GLU:HB2 | 14 | 0.02 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:51:GLU:HB2 | 14 | 0.02 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:51:GLU:HB2 | 14 | 0.02 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:51:GLU:HB2 | 28 | 0.02 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:51:GLU:HB2 | 28 | 0.02 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:51:GLU:HB2 | 28 | 0.02 |
| (1,1158) | 1:A:54:LEU:HB3 | 1:A:48:LEU:HB3 | 29 | 0.02 |
| (1,1149) | 1:A:54:LEU:HB3 | 1:A:48:LEU:HG | 18 | 0.02 |
| (1,1147) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:48:LEU:HB3 | 15 | 0.02 |
| (1,1147) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:48:LEU:HB3 | 19 | 0.02 |
| (1,1147) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:48:LEU:HB3 | 22 | 0.02 |
| (1,1108) | 1:A:48:LEU:HA | 1:A:52:HIS:HB3 | 7 | 0.02 |
| (1,1108) | 1:A:48:LEU:HA | 1:A:52:HIS:HB3 | 22 | 0.02 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD21 | 1:A:42:VAL:H | 1 | 0.02 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD22 | 1:A:42:VAL:H | 1 | 0.02 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD23 | 1:A:42:VAL:H | 1 | 0.02 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD21 | 1:A:42:VAL:H | 29 | 0.02 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD22 | 1:A:42:VAL:H | 29 | 0.02 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD23 | 1:A:42:VAL:H | 29 | 0.02 |
| (1,1091) | 1:A:39:LEU:HD11 | 1:A:39:LEU:HA | 28 | 0.02 |
| (1,1091) | 1:A:39:LEU:HD12 | 1:A:39:LEU:HA | 28 | 0.02 |
| (1,1091) | 1:A:39:LEU:HD13 | 1:A:39:LEU:HA | 28 | 0.02 |
| (1,1071) | 1:A:36:LEU:HG | 1:A:38:SER:H | 7 | 0.02 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG21 | 9 | 0.02 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG22 | 9 | 0.02 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG23 | 9 | 0.02 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG21 | 9 | 0.02 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG22 | 9 | 0.02 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG23 | 9 | 0.02 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG21 | 9 | 0.02 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG22 | 9 | 0.02 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:44:VAL:HG23 | 9 | 0.02 |
| (1,1037) | 1:A:36:LEU:HB3 | 1:A:40:MET:HA | 9 | 0.02 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:H | 12 | 0.02 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:H | 12 | 0.02 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:H | 12 | 0.02 |
| (1,1016) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:29:SER:H | 4 | 0.02 |
| (1,1016) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:29:SER:H | 4 | 0.02 |
| (1,1016) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:29:SER:H | 4 | 0.02 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:31:LEU:HA | 8 | 0.02 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:31:LEU:HA | 8 | 0.02 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:31:LEU:HA | 8 | 0.02 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:31:LEU:HA | 22 | 0.02 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:31:LEU:HA | 22 | 0.02 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:31:LEU:HA | 22 | 0.02 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:31:LEU:HA | 25 | 0.02 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:31:LEU:HA | 25 | 0.02 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:31:LEU:HA | 25 | 0.02 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:31:LEU:HA | 30 | 0.02 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:31:LEU:HA | 30 | 0.02 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:31:LEU:HA | 30 | 0.02 |
| (1,1000) | 1:A:33:ASP:HB2 | 1:A:35:GLY:H | 22 | 0.02 |
| (1,996) | 1:A:33:ASP:HB2 | 1:A:29:SER:HB2 | 12 | 0.01 |
| (1,996) | 1:A:33:ASP:HB2 | 1:A:29:SER:HB2 | 22 | 0.01 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:70:GLN:HE21 | 5 | 0.01 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:70:GLN:HE21 | 5 | 0.01 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:70:GLN:HE21 | 5 | 0.01 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:70:GLN:HE21 | 11 | 0.01 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:70:GLN:HE21 | 11 | 0.01 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:70:GLN:HE21 | 11 | 0.01 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:70:GLN:HE21 | 13 | 0.01 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:70:GLN:HE21 | 13 | 0.01 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:70:GLN:HE21 | 13 | 0.01 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:70:GLN:HE21 | 15 | 0.01 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:70:GLN:HE21 | 15 | 0.01 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:70:GLN:HE21 | 15 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|-----------------|
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:70:GLN:HE21 | 16 | 0.01 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:70:GLN:HE21 | 16 | 0.01 |
| (1,972) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:70:GLN:HE21 | 16 | 0.01 |
| (1,971) | 1:A:27:LEU:HD11 | 1:A:25:ILE:H | 15 | 0.01 |
| (1,971) | 1:A:27:LEU:HD12 | 1:A:25:ILE:H | 15 | 0.01 |
| (1,971) | 1:A:27:LEU:HD13 | 1:A:25:ILE:H | 15 | 0.01 |
| (1,969) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:27:LEU:HA | 12 | 0.01 |
| (1,969) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:27:LEU:HA | 12 | 0.01 |
| (1,969) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:27:LEU:HA | 12 | 0.01 |
| (1,968) | 1:A:27:LEU:HD11 | 1:A:67:ARG:HA | 4 | 0.01 |
| (1,968) | 1:A:27:LEU:HD12 | 1:A:67:ARG:HA | 4 | 0.01 |
| (1,968) | 1:A:27:LEU:HD13 | 1:A:67:ARG:HA | 4 | 0.01 |
| (1,968) | 1:A:27:LEU:HD11 | 1:A:67:ARG:HA | 9 | 0.01 |
| (1,968) | 1:A:27:LEU:HD12 | 1:A:67:ARG:HA | 9 | 0.01 |
| (1,968) | 1:A:27:LEU:HD13 | 1:A:67:ARG:HA | 9 | 0.01 |
| (1,968) | 1:A:27:LEU:HD11 | 1:A:67:ARG:HA | 11 | 0.01 |
| (1,968) | 1:A:27:LEU:HD12 | 1:A:67:ARG:HA | 11 | 0.01 |
| (1,968) | 1:A:27:LEU:HD13 | 1:A:67:ARG:HA | 11 | 0.01 |
| (1,939) | 1:A:57:PRO:HD2 | 1:A:60:GLU:HG2 | 22 | 0.01 |
| (1,939) | 1:A:57:PRO:HD2 | 1:A:60:GLU:HG3 | 22 | 0.01 |
| (1,933) | 1:A:57:PRO:HG3 | 1:A:60:GLU:H | 1 | 0.01 |
| (1,931) | 1:A:57:PRO:HG3 | 1:A:60:GLU:HG2 | 29 | 0.01 |
| (1,931) | 1:A:57:PRO:HG3 | 1:A:60:GLU:HG3 | 29 | 0.01 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:43:GLU:H | 8 | 0.01 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG22 | 1:A:43:GLU:H | 8 | 0.01 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG23 | 1:A:43:GLU:H | 8 | 0.01 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:42:VAL:H | 8 | 0.01 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG22 | 1:A:42:VAL:H | 8 | 0.01 |
| (1,9) | 1:A:16:ILE:HG23 | 1:A:42:VAL:H | 8 | 0.01 |
| (1,9) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:50:ARG:HE | 8 | 0.01 |
| (1,9) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:50:ARG:HE | 8 | 0.01 |
| (1,9) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:50:ARG:HE | 8 | 0.01 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:9:LEU:HD11 | 8 | 0.01 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:9:LEU:HD12 | 8 | 0.01 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:9:LEU:HD13 | 8 | 0.01 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:9:LEU:HD11 | 8 | 0.01 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:9:LEU:HD12 | 8 | 0.01 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:9:LEU:HD13 | 8 | 0.01 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:9:LEU:HD11 | 8 | 0.01 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:9:LEU:HD12 | 8 | 0.01 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:9:LEU:HD13 | 8 | 0.01 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:9:LEU:HD11 | 9 | 0.01 |
| | | | <u> </u> | nd on nort nago |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|-------|---------------|
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:9:LEU:HD12 | 9 | 0.01 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:9:LEU:HD13 | 9 | 0.01 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:9:LEU:HD11 | 9 | 0.01 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:9:LEU:HD12 | 9 | 0.01 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:9:LEU:HD13 | 9 | 0.01 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:9:LEU:HD11 | 9 | 0.01 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:9:LEU:HD12 | 9 | 0.01 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:9:LEU:HD13 | 9 | 0.01 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:9:LEU:HD11 | 22 | 0.01 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:9:LEU:HD12 | 22 | 0.01 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:9:LEU:HD13 | 22 | 0.01 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:9:LEU:HD11 | 22 | 0.01 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:9:LEU:HD12 | 22 | 0.01 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:9:LEU:HD13 | 22 | 0.01 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:9:LEU:HD11 | 22 | 0.01 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:9:LEU:HD12 | 22 | 0.01 |
| (1,899) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:9:LEU:HD13 | 22 | 0.01 |
| (1,880) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:10:VAL:H | 11 | 0.01 |
| (1,880) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:10:VAL:H | 11 | 0.01 |
| (1,880) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:10:VAL:H | 11 | 0.01 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:68:LYS:HB2 | 5 | 0.01 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:68:LYS:HB3 | 5 | 0.01 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:68:LYS:HB2 | 5 | 0.01 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:68:LYS:HB3 | 5 | 0.01 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:68:LYS:HB2 | 5 | 0.01 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:68:LYS:HB3 | 5 | 0.01 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:68:LYS:HB2 | 8 | 0.01 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:68:LYS:HB3 | 8 | 0.01 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:68:LYS:HB2 | 8 | 0.01 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:68:LYS:HB3 | 8 | 0.01 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:68:LYS:HB2 | 8 | 0.01 |
| (1,876) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:68:LYS:HB3 | 8 | 0.01 |
| (1,867) | 1:A:10:VAL:HB | 1:A:11:LYS:H | 17 | 0.01 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 7 | 0.01 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 7 | 0.01 |
| (1,862) | 1:A:10:VAL:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 7 | 0.01 |
| (1,846) | 1:A:8:ASP:HB3 | 1:A:11:LYS:HD2 | 4 | 0.01 |
| (1,846) | 1:A:8:ASP:HB3 | 1:A:11:LYS:HD3 | 4 | 0.01 |
| (1,846) | 1:A:8:ASP:HB3 | 1:A:11:LYS:HD2 | 15 | 0.01 |
| (1,846) | 1:A:8:ASP:HB3 | 1:A:11:LYS:HD3 | 15 | 0.01 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:9:LEU:HB3 | 2 | 0.01 |
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG2 | 2 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,82) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:7:ARG:HG3 | 2 | 0.01 |
| (1,808) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:30:SER:HA | 3 | 0.01 |
| (1,808) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:30:SER:HA | 3 | 0.01 |
| (1,808) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:30:SER:HA | 3 | 0.01 |
| (1,808) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:30:SER:HA | 21 | 0.01 |
| (1,808) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:30:SER:HA | 21 | 0.01 |
| (1,808) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:30:SER:HA | 21 | 0.01 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD11 | 4 | 0.01 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD12 | 4 | 0.01 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD13 | 4 | 0.01 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD11 | 8 | 0.01 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD12 | 8 | 0.01 |
| (1,801) | 1:A:65:THR:HA | 1:A:31:LEU:HD13 | 8 | 0.01 |
| (1,798) | 1:A:51:GLU:HG2 | 1:A:50:ARG:HG2 | 1 | 0.01 |
| (1,798) | 1:A:51:GLU:HG3 | 1:A:50:ARG:HG2 | 1 | 0.01 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD11 | 6 | 0.01 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD12 | 6 | 0.01 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD13 | 6 | 0.01 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 6 | 0.01 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 6 | 0.01 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 6 | 0.01 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD11 | 11 | 0.01 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD12 | 11 | 0.01 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD13 | 11 | 0.01 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 11 | 0.01 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 11 | 0.01 |
| (1,783) | 1:A:52:HIS:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 11 | 0.01 |
| (1,755) | 1:A:70:GLN:HG2 | 1:A:10:VAL:HG21 | 2 | 0.01 |
| (1,755) | 1:A:70:GLN:HG2 | 1:A:10:VAL:HG22 | 2 | 0.01 |
| (1,755) | 1:A:70:GLN:HG2 | 1:A:10:VAL:HG23 | 2 | 0.01 |
| (1,743) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:72:MET:H | 13 | 0.01 |
| (1,743) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:72:MET:H | 13 | 0.01 |
| (1,743) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:72:MET:H | 21 | 0.01 |
| (1,743) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:72:MET:H | 21 | 0.01 |
| (1,743) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:72:MET:H | 24 | 0.01 |
| (1,743) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:72:MET:H | 24 | 0.01 |
| (1,740) | 1:A:70:GLN:HA | 1:A:10:VAL:HG21 | 4 | 0.01 |
| (1,740) | 1:A:70:GLN:HA | 1:A:10:VAL:HG22 | 4 | 0.01 |
| (1,740) | 1:A:70:GLN:HA | 1:A:10:VAL:HG23 | 4 | 0.01 |
| (1,740) | 1:A:70:GLN:HA | 1:A:10:VAL:HG21 | 17 | 0.01 |
| (1,740) | 1:A:70:GLN:HA | 1:A:10:VAL:HG22 | 17 | 0.01 |
| (1,740) | 1:A:70:GLN:HA | 1:A:10:VAL:HG23 | 17 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,732) | 1:A:63:GLN:HG3 | 1:A:60:GLU:HA | 4 | 0.01 |
| (1,732) | 1:A:63:GLN:HG3 | 1:A:60:GLU:HA | 13 | 0.01 |
| (1,732) | 1:A:63:GLN:HG3 | 1:A:60:GLU:HA | 26 | 0.01 |
| (1,730) | 1:A:63:GLN:HG2 | 1:A:60:GLU:HA | 2 | 0.01 |
| (1,715) | 1:A:63:GLN:HB3 | 1:A:60:GLU:HA | 13 | 0.01 |
| (1,711) | 1:A:63:GLN:HA | 1:A:30:SER:HB2 | 3 | 0.01 |
| (1,711) | 1:A:63:GLN:HA | 1:A:30:SER:HB2 | 14 | 0.01 |
| (1,710) | 1:A:63:GLN:HA | 1:A:30:SER:HB3 | 24 | 0.01 |
| (1,706) | 1:A:59:ARG:HD2 | 1:A:59:ARG:H | 7 | 0.01 |
| (1,706) | 1:A:59:ARG:HD3 | 1:A:59:ARG:H | 7 | 0.01 |
| (1,706) | 1:A:59:ARG:HD2 | 1:A:59:ARG:H | 10 | 0.01 |
| (1,706) | 1:A:59:ARG:HD3 | 1:A:59:ARG:H | 10 | 0.01 |
| (1,706) | 1:A:59:ARG:HD2 | 1:A:59:ARG:H | 20 | 0.01 |
| (1,706) | 1:A:59:ARG:HD3 | 1:A:59:ARG:H | 20 | 0.01 |
| (1,706) | 1:A:59:ARG:HD2 | 1:A:59:ARG:H | 23 | 0.01 |
| (1,706) | 1:A:59:ARG:HD3 | 1:A:59:ARG:H | 23 | 0.01 |
| (1,70) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:72:MET:H | 19 | 0.01 |
| (1,70) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:72:MET:H | 19 | 0.01 |
| (1,70) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:72:MET:H | 19 | 0.01 |
| (1,70) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:71:GLU:H | 19 | 0.01 |
| (1,70) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:71:GLU:H | 19 | 0.01 |
| (1,70) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:71:GLU:H | 19 | 0.01 |
| (1,691) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:47:ILE:HD11 | 2 | 0.01 |
| (1,691) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:47:ILE:HD12 | 2 | 0.01 |
| (1,691) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:47:ILE:HD13 | 2 | 0.01 |
| (1,662) | 1:A:49:GLU:HA | 1:A:46:GLN:HA | 2 | 0.01 |
| (1,662) | 1:A:49:GLU:HA | 1:A:46:GLN:HA | 13 | 0.01 |
| (1,638) | 1:A:50:ARG:HD2 | 1:A:50:ARG:HA | 16 | 0.01 |
| (1,638) | 1:A:50:ARG:HD3 | 1:A:50:ARG:HA | 16 | 0.01 |
| (1,607) | 1:A:67:ARG:HA | 1:A:67:ARG:HD3 | 4 | 0.01 |
| (1,607) | 1:A:67:ARG:HA | 1:A:67:ARG:HD3 | 16 | 0.01 |
| (1,607) | 1:A:67:ARG:HA | 1:A:67:ARG:HD3 | 17 | 0.01 |
| (1,607) | 1:A:67:ARG:HA | 1:A:67:ARG:HD3 | 26 | 0.01 |
| (1,607) | 1:A:67:ARG:HA | 1:A:67:ARG:HD3 | 29 | 0.01 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:66:LEU:HA | 3 | 0.01 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:66:LEU:HA | 3 | 0.01 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:66:LEU:HA | 3 | 0.01 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:66:LEU:HA | 4 | 0.01 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:66:LEU:HA | 4 | 0.01 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:66:LEU:HA | 4 | 0.01 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:66:LEU:HA | 5 | 0.01 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:66:LEU:HA | 5 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | $\mathbf{Atom}	extbf{-2}$ | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|---------------------------|-------|---------------|
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:66:LEU:HA | 5 | 0.01 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:66:LEU:HA | 19 | 0.01 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:66:LEU:HA | 19 | 0.01 |
| (1,593) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:66:LEU:HA | 19 | 0.01 |
| (1,59) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:64:LEU:HB2 | 19 | 0.01 |
| (1,59) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:64:LEU:HB2 | 19 | 0.01 |
| (1,59) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:64:LEU:HB2 | 19 | 0.01 |
| (1,59) | 1:A:66:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HB2 | 19 | 0.01 |
| (1,59) | 1:A:66:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HB2 | 19 | 0.01 |
| (1,59) | 1:A:66:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HB2 | 19 | 0.01 |
| (1,58) | 1:A:66:LEU:HD21 | 1:A:10:VAL:HB | 6 | 0.01 |
| (1,58) | 1:A:66:LEU:HD22 | 1:A:10:VAL:HB | 6 | 0.01 |
| (1,58) | 1:A:66:LEU:HD23 | 1:A:10:VAL:HB | 6 | 0.01 |
| (1,58) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:43:GLU:HB2 | 6 | 0.01 |
| (1,58) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:43:GLU:HB2 | 6 | 0.01 |
| (1,58) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:43:GLU:HB2 | 6 | 0.01 |
| (1,58) | 1:A:66:LEU:HD21 | 1:A:10:VAL:HB | 7 | 0.01 |
| (1,58) | 1:A:66:LEU:HD22 | 1:A:10:VAL:HB | 7 | 0.01 |
| (1,58) | 1:A:66:LEU:HD23 | 1:A:10:VAL:HB | 7 | 0.01 |
| (1,58) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:43:GLU:HB2 | 7 | 0.01 |
| (1,58) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:43:GLU:HB2 | 7 | 0.01 |
| (1,58) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:43:GLU:HB2 | 7 | 0.01 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB1 | 9 | 0.01 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB2 | 9 | 0.01 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB3 | 9 | 0.01 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB1 | 9 | 0.01 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB2 | 9 | 0.01 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB3 | 9 | 0.01 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB1 | 9 | 0.01 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB2 | 9 | 0.01 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB3 | 9 | 0.01 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB1 | 23 | 0.01 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB2 | 23 | 0.01 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:14:ALA:HB3 | 23 | 0.01 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB1 | 23 | 0.01 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB2 | 23 | 0.01 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:14:ALA:HB3 | 23 | 0.01 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB1 | 23 | 0.01 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB2 | 23 | 0.01 |
| (1,536) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:14:ALA:HB3 | 23 | 0.01 |
| (1,531) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:22:LEU:HA | 1 | 0.01 |
| (1,531) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:22:LEU:HA | 1 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,531) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:22:LEU:HA | 1 | 0.01 |
| (1,531) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:22:LEU:HA | 6 | 0.01 |
| (1,531) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:22:LEU:HA | 6 | 0.01 |
| (1,531) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:22:LEU:HA | 6 | 0.01 |
| (1,531) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:22:LEU:HA | 10 | 0.01 |
| (1,531) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:22:LEU:HA | 10 | 0.01 |
| (1,531) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:22:LEU:HA | 10 | 0.01 |
| (1,531) | 1:A:25:ILE:HD11 | 1:A:22:LEU:HA | 28 | 0.01 |
| (1,531) | 1:A:25:ILE:HD12 | 1:A:22:LEU:HA | 28 | 0.01 |
| (1,531) | 1:A:25:ILE:HD13 | 1:A:22:LEU:HA | 28 | 0.01 |
| (1,521) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:27:LEU:HD21 | 22 | 0.01 |
| (1,521) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:27:LEU:HD22 | 22 | 0.01 |
| (1,521) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:27:LEU:HD23 | 22 | 0.01 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD11 | 11 | 0.01 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD12 | 11 | 0.01 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD13 | 11 | 0.01 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD11 | 14 | 0.01 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD12 | 14 | 0.01 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD13 | 14 | 0.01 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD11 | 27 | 0.01 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD12 | 27 | 0.01 |
| (1,513) | 1:A:25:ILE:HB | 1:A:22:LEU:HD13 | 27 | 0.01 |
| (1,498) | 1:A:47:ILE:HD11 | 1:A:43:GLU:HG3 | 6 | 0.01 |
| (1,498) | 1:A:47:ILE:HD12 | 1:A:43:GLU:HG3 | 6 | 0.01 |
| (1,498) | 1:A:47:ILE:HD13 | 1:A:43:GLU:HG3 | 6 | 0.01 |
| (1,491) | 1:A:27:LEU:HA | 1:A:66:LEU:H | 3 | 0.01 |
| (1,491) | 1:A:27:LEU:HA | 1:A:66:LEU:H | 17 | 0.01 |
| (1,49) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:43:GLU:HG3 | 22 | 0.01 |
| (1,49) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:43:GLU:HG3 | 22 | 0.01 |
| (1,49) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:43:GLU:HG3 | 22 | 0.01 |
| (1,49) | 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:43:GLU:HG3 | 22 | 0.01 |
| (1,49) | 1:A:16:ILE:HG22 | 1:A:43:GLU:HG3 | 22 | 0.01 |
| (1,49) | 1:A:16:ILE:HG23 | 1:A:43:GLU:HG3 | 22 | 0.01 |
| (1,479) | 1:A:23:ALA:HA | 1:A:21:ASP:HA | 26 | 0.01 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:20:ARG:HB2 | 11 | 0.01 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:20:ARG:HB2 | 11 | 0.01 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:20:ARG:HB2 | 11 | 0.01 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:20:ARG:HB2 | 29 | 0.01 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:20:ARG:HB2 | 29 | 0.01 |
| (1,475) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:20:ARG:HB2 | 29 | 0.01 |
| (1,469) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:16:ILE:H | 10 | 0.01 |
| (1,469) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:16:ILE:H | 10 | 0.01 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,469) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:16:ILE:H | 10 | 0.01 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD11 | 1 | 0.01 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD12 | 1 | 0.01 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD13 | 1 | 0.01 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD11 | 3 | 0.01 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD12 | 3 | 0.01 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD13 | 3 | 0.01 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD11 | 7 | 0.01 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD12 | 7 | 0.01 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD13 | 7 | 0.01 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD11 | 8 | 0.01 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD12 | 8 | 0.01 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD13 | 8 | 0.01 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD11 | 21 | 0.01 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD12 | 21 | 0.01 |
| (1,461) | 1:A:47:ILE:HG12 | 1:A:48:LEU:HD13 | 21 | 0.01 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD11 | 1 | 0.01 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD12 | 1 | 0.01 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD13 | 1 | 0.01 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD11 | 3 | 0.01 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD12 | 3 | 0.01 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD13 | 3 | 0.01 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD11 | 6 | 0.01 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD12 | 6 | 0.01 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD13 | 6 | 0.01 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD11 | 8 | 0.01 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD12 | 8 | 0.01 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD13 | 8 | 0.01 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD11 | 10 | 0.01 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD12 | 10 | 0.01 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD13 | 10 | 0.01 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD11 | 13 | 0.01 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD12 | 13 | 0.01 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD13 | 13 | 0.01 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD11 | 20 | 0.01 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD12 | 20 | 0.01 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD13 | 20 | 0.01 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD11 | 21 | 0.01 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD12 | 21 | 0.01 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD13 | 21 | 0.01 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD11 | 25 | 0.01 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD12 | 25 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD13 | 25 | 0.01 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD11 | 27 | 0.01 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD12 | 27 | 0.01 |
| (1,460) | 1:A:47:ILE:HG13 | 1:A:48:LEU:HD13 | 27 | 0.01 |
| (1,453) | 1:A:47:ILE:HA | 1:A:50:ARG:H | 8 | 0.01 |
| (1,444) | 1:A:47:ILE:HA | 1:A:50:ARG:HB3 | 8 | 0.01 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:17:LEU:H | 13 | 0.01 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:17:LEU:H | 13 | 0.01 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:17:LEU:H | 13 | 0.01 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:73:SER:H | 13 | 0.01 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:73:SER:H | 13 | 0.01 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:73:SER:H | 13 | 0.01 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:18:GLY:H | 13 | 0.01 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:18:GLY:H | 13 | 0.01 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:18:GLY:H | 13 | 0.01 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:17:LEU:H | 27 | 0.01 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:17:LEU:H | 27 | 0.01 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:17:LEU:H | 27 | 0.01 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:73:SER:H | 27 | 0.01 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:73:SER:H | 27 | 0.01 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:73:SER:H | 27 | 0.01 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:18:GLY:H | 27 | 0.01 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:18:GLY:H | 27 | 0.01 |
| (1,43) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:18:GLY:H | 27 | 0.01 |
| (1,417) | 1:A:45:ARG:HD2 | 1:A:61:VAL:HG11 | 11 | 0.01 |
| (1,417) | 1:A:45:ARG:HD2 | 1:A:61:VAL:HG12 | 11 | 0.01 |
| (1,417) | 1:A:45:ARG:HD2 | 1:A:61:VAL:HG13 | 11 | 0.01 |
| (1,417) | 1:A:45:ARG:HD3 | 1:A:61:VAL:HG11 | 11 | 0.01 |
| (1,417) | 1:A:45:ARG:HD3 | 1:A:61:VAL:HG12 | 11 | 0.01 |
| (1,417) | 1:A:45:ARG:HD3 | 1:A:61:VAL:HG13 | 11 | 0.01 |
| (1,417) | 1:A:45:ARG:HD2 | 1:A:61:VAL:HG11 | 16 | 0.01 |
| (1,417) | 1:A:45:ARG:HD2 | 1:A:61:VAL:HG12 | 16 | 0.01 |
| (1,417) | 1:A:45:ARG:HD2 | 1:A:61:VAL:HG13 | 16 | 0.01 |
| (1,417) | 1:A:45:ARG:HD3 | 1:A:61:VAL:HG11 | 16 | 0.01 |
| (1,417) | 1:A:45:ARG:HD3 | 1:A:61:VAL:HG12 | 16 | 0.01 |
| (1,417) | 1:A:45:ARG:HD3 | 1:A:61:VAL:HG13 | 16 | 0.01 |
| (1,405) | 1:A:41:GLY:HA3 | 1:A:44:VAL:HG11 | 11 | 0.01 |
| (1,405) | 1:A:41:GLY:HA3 | 1:A:44:VAL:HG12 | 11 | 0.01 |
| (1,405) | 1:A:41:GLY:HA3 | 1:A:44:VAL:HG13 | 11 | 0.01 |
| (1,405) | 1:A:41:GLY:HA3 | 1:A:44:VAL:HG11 | 13 | 0.01 |
| (1,405) | 1:A:41:GLY:HA3 | 1:A:44:VAL:HG12 | 13 | 0.01 |
| (1,405) | 1:A:41:GLY:HA3 | 1:A:44:VAL:HG13 | 13 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:25:ILE:HG13 | 13 | 0.01 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:25:ILE:HG13 | 13 | 0.01 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:25:ILE:HG13 | 13 | 0.01 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:25:ILE:HG13 | 21 | 0.01 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:25:ILE:HG13 | 21 | 0.01 |
| (1,394) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:25:ILE:HG13 | 21 | 0.01 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:21:ASP:HA | 13 | 0.01 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:21:ASP:HA | 13 | 0.01 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:21:ASP:HA | 13 | 0.01 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:21:ASP:HA | 16 | 0.01 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:21:ASP:HA | 16 | 0.01 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:21:ASP:HA | 16 | 0.01 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:21:ASP:HA | 18 | 0.01 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:21:ASP:HA | 18 | 0.01 |
| (1,391) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:21:ASP:HA | 18 | 0.01 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:32:ALA:HA | 11 | 0.01 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:32:ALA:HA | 11 | 0.01 |
| (1,38) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:32:ALA:HA | 11 | 0.01 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG21 | 1:A:50:ARG:HA | 11 | 0.01 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG22 | 1:A:50:ARG:HA | 11 | 0.01 |
| (1,38) | 1:A:47:ILE:HG23 | 1:A:50:ARG:HA | 11 | 0.01 |
| (1,373) | 1:A:19:ILE:HB | 1:A:19:ILE:H | 3 | 0.01 |
| (1,373) | 1:A:19:ILE:HB | 1:A:19:ILE:H | 8 | 0.01 |
| (1,373) | 1:A:19:ILE:HB | 1:A:19:ILE:H | 10 | 0.01 |
| (1,373) | 1:A:19:ILE:HB | 1:A:19:ILE:H | 15 | 0.01 |
| (1,373) | 1:A:19:ILE:HB | 1:A:19:ILE:H | 18 | 0.01 |
| (1,373) | 1:A:19:ILE:HB | 1:A:19:ILE:H | 23 | 0.01 |
| (1,373) | 1:A:19:ILE:HB | 1:A:19:ILE:H | 25 | 0.01 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG21 | 6 | 0.01 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG22 | 6 | 0.01 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG23 | 6 | 0.01 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG21 | 19 | 0.01 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG22 | 19 | 0.01 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG23 | 19 | 0.01 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG21 | 24 | 0.01 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG22 | 24 | 0.01 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG23 | 24 | 0.01 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG21 | 30 | 0.01 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG22 | 30 | 0.01 |
| (1,363) | 1:A:17:LEU:HG | 1:A:19:ILE:HG23 | 30 | 0.01 |
| (1,32) | 1:A:27:LEU:HD11 | 1:A:70:GLN:HE21 | 22 | 0.01 |
| (1,32) | 1:A:27:LEU:HD12 | 1:A:70:GLN:HE21 | 22 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,32) | 1:A:27:LEU:HD13 | 1:A:70:GLN:HE21 | 22 | 0.01 |
| (1,32) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:70:GLN:HE21 | 22 | 0.01 |
| (1,32) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:70:GLN:HE21 | 22 | 0.01 |
| (1,32) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:70:GLN:HE21 | 22 | 0.01 |
| (1,319) | 1:A:45:ARG:HB2 | 1:A:48:LEU:H | 24 | 0.01 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 18 | 0.01 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 18 | 0.01 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 18 | 0.01 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD21 | 21 | 0.01 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD22 | 21 | 0.01 |
| (1,315) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:39:LEU:HD23 | 21 | 0.01 |
| (1,306) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:38:SER:H | 19 | 0.01 |
| (1,306) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:38:SER:H | 21 | 0.01 |
| (1,306) | 1:A:40:MET:HB3 | 1:A:38:SER:H | 26 | 0.01 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HG | 18 | 0.01 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HG | 18 | 0.01 |
| (1,244) | 1:A:31:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HG | 18 | 0.01 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 24 | 0.01 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 24 | 0.01 |
| (1,241) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 24 | 0.01 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD11 | 1:A:62:ARG:HG3 | 24 | 0.01 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD12 | 1:A:62:ARG:HG3 | 24 | 0.01 |
| (1,239) | 1:A:31:LEU:HD13 | 1:A:62:ARG:HG3 | 24 | 0.01 |
| (1,229) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD21 | 20 | 0.01 |
| (1,229) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD22 | 20 | 0.01 |
| (1,229) | 1:A:31:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD23 | 20 | 0.01 |
| (1,221) | 1:A:31:LEU:HB2 | 1:A:36:LEU:HB2 | 9 | 0.01 |
| (1,221) | 1:A:31:LEU:HB2 | 1:A:36:LEU:HB2 | 17 | 0.01 |
| (1,213) | 1:A:30:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HA | 1 | 0.01 |
| (1,213) | 1:A:30:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HA | 14 | 0.01 |
| (1,213) | 1:A:30:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HA | 16 | 0.01 |
| (1,209) | 1:A:30:SER:HB2 | 1:A:31:LEU:H | 27 | 0.01 |
| (1,196) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:33:ASP:HB2 | 20 | 0.01 |
| (1,194) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HG | 14 | 0.01 |
| (1,194) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HG | 19 | 0.01 |
| (1,193) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD11 | 8 | 0.01 |
| (1,193) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD12 | 8 | 0.01 |
| (1,193) | 1:A:29:SER:HB3 | 1:A:34:LEU:HD13 | 8 | 0.01 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:74:SER:H | 23 | 0.01 |
| (1,18) | 1:A:71:GLU:HA | 1:A:69:LEU:H | 23 | 0.01 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG21 | 5 | 0.01 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG22 | 5 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG23 | 5 | 0.01 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG21 | 13 | 0.01 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG22 | 13 | 0.01 |
| (1,1732) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:65:THR:HG23 | 13 | 0.01 |
| (1,1725) | 1:A:80:THR:H | 1:A:79:ASP:H | 28 | 0.01 |
| (1,1724) | 1:A:78:SER:H | 1:A:77:GLY:H | 22 | 0.01 |
| (1,1710) | 1:A:63:GLN:H | 1:A:64:LEU:H | 14 | 0.01 |
| (1,1710) | 1:A:63:GLN:H | 1:A:64:LEU:H | 24 | 0.01 |
| (1,1701) | 1:A:47:ILE:H | 1:A:48:LEU:H | 2 | 0.01 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:9:LEU:HD21 | 19 | 0.01 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:9:LEU:HD22 | 19 | 0.01 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:9:LEU:HD23 | 19 | 0.01 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:48:LEU:HD11 | 19 | 0.01 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:48:LEU:HD12 | 19 | 0.01 |
| (1,17) | 1:A:72:MET:HB3 | 1:A:48:LEU:HD13 | 19 | 0.01 |
| (1,1692) | 1:A:33:ASP:H | 1:A:36:LEU:H | 11 | 0.01 |
| (1,1692) | 1:A:33:ASP:H | 1:A:36:LEU:H | 15 | 0.01 |
| (1,1679) | 1:A:24:GLY:H | 1:A:22:LEU:H | 7 | 0.01 |
| (1,1663) | 1:A:11:LYS:H | 1:A:15:HIS:H | 21 | 0.01 |
| (1,1646) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:9:LEU:H | 16 | 0.01 |
| (1,1645) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:9:LEU:H | 13 | 0.01 |
| (1,1645) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:9:LEU:H | 13 | 0.01 |
| (1,1645) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:9:LEU:H | 13 | 0.01 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG21 | 6 | 0.01 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG22 | 6 | 0.01 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG23 | 6 | 0.01 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG21 | 12 | 0.01 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG22 | 12 | 0.01 |
| (1,1631) | 1:A:73:SER:HB2 | 1:A:10:VAL:HG23 | 12 | 0.01 |
| (1,1624) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:57:PRO:HD2 | 5 | 0.01 |
| (1,1624) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:57:PRO:HD2 | 5 | 0.01 |
| (1,1624) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:57:PRO:HD2 | 5 | 0.01 |
| (1,1624) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:57:PRO:HD2 | 26 | 0.01 |
| (1,1624) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:57:PRO:HD2 | 26 | 0.01 |
| (1,1624) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:57:PRO:HD2 | 26 | 0.01 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:9:LEU:HD21 | 20 | 0.01 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:9:LEU:HD22 | 20 | 0.01 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB2 | 1:A:9:LEU:HD23 | 20 | 0.01 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:9:LEU:HD21 | 20 | 0.01 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:9:LEU:HD22 | 20 | 0.01 |
| (1,1598) | 1:A:70:GLN:HB3 | 1:A:9:LEU:HD23 | 20 | 0.01 |
| (1,1596) | 1:A:12:ALA:HA | 1:A:7:ARG:HD2 | 29 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|-------|---------------|
| (1,1596) | 1:A:12:ALA:HA | 1:A:7:ARG:HD3 | 29 | 0.01 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:29:SER:HA | 11 | 0.01 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:29:SER:HA | 11 | 0.01 |
| (1,1593) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:29:SER:HA | 11 | 0.01 |
| (1,1592) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:30:SER:H | 7 | 0.01 |
| (1,1592) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:30:SER:H | 7 | 0.01 |
| (1,1592) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:30:SER:H | 7 | 0.01 |
| (1,1589) | 1:A:20:ARG:HG3 | 1:A:67:ARG:HE | 30 | 0.01 |
| (1,1587) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:75:LYS:HE2 | 3 | 0.01 |
| (1,1587) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:75:LYS:HE3 | 3 | 0.01 |
| (1,1587) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:75:LYS:HE2 | 7 | 0.01 |
| (1,1587) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:75:LYS:HE3 | 7 | 0.01 |
| (1,1587) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:75:LYS:HE2 | 9 | 0.01 |
| (1,1587) | 1:A:9:LEU:HG | 1:A:75:LYS:HE3 | 9 | 0.01 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:65:THR:HA | 22 | 0.01 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:65:THR:HA | 22 | 0.01 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:65:THR:HA | 22 | 0.01 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:65:THR:HA | 28 | 0.01 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:65:THR:HA | 28 | 0.01 |
| (1,1576) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:65:THR:HA | 28 | 0.01 |
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:13:VAL:H | 4 | 0.01 |
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:13:VAL:H | 4 | 0.01 |
| (1,1575) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:13:VAL:H | 4 | 0.01 |
| (1,1574) | 1:A:16:ILE:HG21 | 1:A:40:MET:HG2 | 30 | 0.01 |
| (1,1574) | 1:A:16:ILE:HG22 | 1:A:40:MET:HG2 | 30 | 0.01 |
| (1,1574) | 1:A:16:ILE:HG23 | 1:A:40:MET:HG2 | 30 | 0.01 |
| (1,1561) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:23:ALA:HA | 1 | 0.01 |
| (1,1561) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:23:ALA:HA | 1 | 0.01 |
| (1,1561) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:23:ALA:HA | 1 | 0.01 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:26:ASN:H | 30 | 0.01 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:26:ASN:H | 30 | 0.01 |
| (1,1553) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:26:ASN:H | 30 | 0.01 |
| (1,1552) | 1:A:19:ILE:HG21 | 1:A:24:GLY:H | 20 | 0.01 |
| (1,1552) | 1:A:19:ILE:HG22 | 1:A:24:GLY:H | 20 | 0.01 |
| (1,1552) | 1:A:19:ILE:HG23 | 1:A:24:GLY:H | 20 | 0.01 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:40:MET:HA | 28 | 0.01 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:40:MET:HA | 28 | 0.01 |
| (1,1547) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:40:MET:HA | 28 | 0.01 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:42:VAL:HA | 4 | 0.01 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:42:VAL:HA | 4 | 0.01 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:42:VAL:HA | 4 | 0.01 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:42:VAL:HA | 17 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:42:VAL:HA | 17 | 0.01 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:42:VAL:HA | 17 | 0.01 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:42:VAL:HA | 21 | 0.01 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:42:VAL:HA | 21 | 0.01 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:42:VAL:HA | 21 | 0.01 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:42:VAL:HA | 29 | 0.01 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:42:VAL:HA | 29 | 0.01 |
| (1,1546) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:42:VAL:HA | 29 | 0.01 |
| (1,1531) | 1:A:10:VAL:HG21 | 1:A:72:MET:H | 23 | 0.01 |
| (1,1531) | 1:A:10:VAL:HG22 | 1:A:72:MET:H | 23 | 0.01 |
| (1,1531) | 1:A:10:VAL:HG23 | 1:A:72:MET:H | 23 | 0.01 |
| (1,1523) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:70:GLN:H | 2 | 0.01 |
| (1,1523) | 1:A:73:SER:HA | 1:A:70:GLN:H | 26 | 0.01 |
| (1,1517) | 1:A:8:ASP:HB3 | 1:A:7:ARG:HA | 13 | 0.01 |
| (1,1517) | 1:A:8:ASP:HB3 | 1:A:7:ARG:HA | 29 | 0.01 |
| (1,1503) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:49:GLU:H | 21 | 0.01 |
| (1,1503) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:49:GLU:H | 21 | 0.01 |
| (1,1503) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:49:GLU:H | 21 | 0.01 |
| (1,1503) | 1:A:55:VAL:HG11 | 1:A:49:GLU:H | 26 | 0.01 |
| (1,1503) | 1:A:55:VAL:HG12 | 1:A:49:GLU:H | 26 | 0.01 |
| (1,1503) | 1:A:55:VAL:HG13 | 1:A:49:GLU:H | 26 | 0.01 |
| (1,1497) | 1:A:65:THR:HG21 | 1:A:63:GLN:HB2 | 7 | 0.01 |
| (1,1497) | 1:A:65:THR:HG22 | 1:A:63:GLN:HB2 | 7 | 0.01 |
| (1,1497) | 1:A:65:THR:HG23 | 1:A:63:GLN:HB2 | 7 | 0.01 |
| (1,1493) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:50:ARG:HD2 | 2 | 0.01 |
| (1,1493) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:50:ARG:HD3 | 2 | 0.01 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:46:GLN:HG2 | 5 | 0.01 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:46:GLN:HG2 | 5 | 0.01 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:46:GLN:HG2 | 5 | 0.01 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:46:GLN:HG2 | 13 | 0.01 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:46:GLN:HG2 | 13 | 0.01 |
| (1,1491) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:46:GLN:HG2 | 13 | 0.01 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:19:ILE:HB | 7 | 0.01 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:19:ILE:HB | 7 | 0.01 |
| (1,1484) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:19:ILE:HB | 7 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG11 | 7 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG12 | 7 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG13 | 7 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG11 | 7 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG12 | 7 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG13 | 7 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG11 | 7 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG12 | 7 | 0.01 |
| | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG13 | 7 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG11 | 14 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG12 | 14 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG13 | 14 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG11 | 14 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG12 | 14 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG13 | 14 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG11 | 14 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG12 | 14 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG13 | 14 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG11 | 22 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG12 | 22 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG13 | 22 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG11 | 22 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG12 | 22 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG13 | 22 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG11 | 22 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG12 | 22 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG13 | 22 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG11 | 23 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG12 | 23 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:13:VAL:HG13 | 23 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG11 | 23 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG12 | 23 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:13:VAL:HG13 | 23 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG11 | 23 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG12 | 23 | 0.01 |
| (1,1481) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:13:VAL:HG13 | 23 | 0.01 |
| (1,1476) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:15:HIS:H | 21 | 0.01 |
| (1,1476) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:15:HIS:H | 21 | 0.01 |
| (1,1476) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:15:HIS:H | 21 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG11 | 1 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG12 | 1 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG13 | 1 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG11 | 2 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG12 | 2 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG13 | 2 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG11 | 5 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG12 | 5 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG13 | 5 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG11 | 6 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG12 | 6 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG13 | 6 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG11 | 8 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG12 | 8 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG13 | 8 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG11 | 9 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG12 | 9 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG13 | 9 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG11 | 14 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG12 | 14 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG13 | 14 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG11 | 20 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG12 | 20 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG13 | 20 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG11 | 22 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG12 | 22 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG13 | 22 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG11 | 25 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG12 | 25 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG13 | 25 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG11 | 26 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG12 | 26 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG13 | 26 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG11 | 27 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG12 | 27 | 0.01 |
| (1,1465) | 1:A:14:ALA:HA | 1:A:13:VAL:HG13 | 27 | 0.01 |
| (1,1447) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:17:LEU:HG | 14 | 0.01 |
| (1,1447) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:17:LEU:HG | 14 | 0.01 |
| (1,1447) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:17:LEU:HG | 14 | 0.01 |
| (1,1447) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:17:LEU:HG | 20 | 0.01 |
| (1,1447) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:17:LEU:HG | 20 | 0.01 |
| (1,1447) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:17:LEU:HG | 20 | 0.01 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:47:ILE:HG13 | 13 | 0.01 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:47:ILE:HG13 | 13 | 0.01 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:47:ILE:HG13 | 13 | 0.01 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:47:ILE:HG13 | 17 | 0.01 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:47:ILE:HG13 | 17 | 0.01 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:47:ILE:HG13 | 17 | 0.01 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:47:ILE:HG13 | 20 | 0.01 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:47:ILE:HG13 | 20 | 0.01 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:47:ILE:HG13 | 20 | 0.01 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG11 | 1:A:47:ILE:HG13 | 29 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG12 | 1:A:47:ILE:HG13 | 29 | 0.01 |
| (1,1445) | 1:A:44:VAL:HG13 | 1:A:47:ILE:HG13 | 29 | 0.01 |
| (1,1435) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:9:LEU:HA | 23 | 0.01 |
| (1,1435) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:9:LEU:HA | 23 | 0.01 |
| (1,1435) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:9:LEU:HA | 23 | 0.01 |
| (1,1435) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:9:LEU:HA | 26 | 0.01 |
| (1,1435) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:9:LEU:HA | 26 | 0.01 |
| (1,1435) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:9:LEU:HA | 26 | 0.01 |
| (1,1427) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:42:VAL:H | 11 | 0.01 |
| (1,1427) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:42:VAL:H | 11 | 0.01 |
| (1,1427) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:42:VAL:H | 11 | 0.01 |
| (1,1423) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:39:LEU:HG | 3 | 0.01 |
| (1,1423) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:39:LEU:HG | 3 | 0.01 |
| (1,1423) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:39:LEU:HG | 3 | 0.01 |
| (1,1423) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:39:LEU:HG | 8 | 0.01 |
| (1,1423) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:39:LEU:HG | 8 | 0.01 |
| (1,1423) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:39:LEU:HG | 8 | 0.01 |
| (1,1423) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:39:LEU:HG | 27 | 0.01 |
| (1,1423) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:39:LEU:HG | 27 | 0.01 |
| (1,1423) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:39:LEU:HG | 27 | 0.01 |
| (1,1411) | 1:A:42:VAL:HG11 | 1:A:43:GLU:HG3 | 29 | 0.01 |
| (1,1411) | 1:A:42:VAL:HG12 | 1:A:43:GLU:HG3 | 29 | 0.01 |
| (1,1411) | 1:A:42:VAL:HG13 | 1:A:43:GLU:HG3 | 29 | 0.01 |
| (1,1407) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:44:VAL:H | 4 | 0.01 |
| (1,1407) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:44:VAL:H | 6 | 0.01 |
| (1,1407) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:44:VAL:H | 8 | 0.01 |
| (1,1407) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:44:VAL:H | 12 | 0.01 |
| (1,1407) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:44:VAL:H | 19 | 0.01 |
| (1,1407) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:44:VAL:H | 20 | 0.01 |
| (1,1407) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:44:VAL:H | 22 | 0.01 |
| (1,1402) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:ARG:HB3 | 24 | 0.01 |
| (1,1393) | 1:A:44:VAL:HA | 1:A:48:LEU:HG | 3 | 0.01 |
| (1,1393) | 1:A:44:VAL:HA | 1:A:48:LEU:HG | 24 | 0.01 |
| (1,1393) | 1:A:44:VAL:HA | 1:A:48:LEU:HG | 27 | 0.01 |
| (1,1387) | 1:A:12:ALA:HB1 | 1:A:7:ARG:HB2 | 29 | 0.01 |
| (1,1387) | 1:A:12:ALA:HB2 | 1:A:7:ARG:HB2 | 29 | 0.01 |
| (1,1387) | 1:A:12:ALA:HB3 | 1:A:7:ARG:HB2 | 29 | 0.01 |
| (1,1369) | 1:A:71:GLU:HG2 | 1:A:72:MET:H | 13 | 0.01 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HB2 | 10 | 0.01 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 10 | 0.01 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:68:LYS:HB2 | 10 | 0.01 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:68:LYS:HB3 | 10 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HB2 | 11 | 0.01 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 11 | 0.01 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:68:LYS:HB2 | 11 | 0.01 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:68:LYS:HB3 | 11 | 0.01 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HB2 | 16 | 0.01 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 16 | 0.01 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:68:LYS:HB2 | 16 | 0.01 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:68:LYS:HB3 | 16 | 0.01 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HB2 | 19 | 0.01 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 19 | 0.01 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:68:LYS:HB2 | 19 | 0.01 |
| (1,1334) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:68:LYS:HB3 | 19 | 0.01 |
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:69:LEU:H | 8 | 0.01 |
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:69:LEU:H | 8 | 0.01 |
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:69:LEU:H | 21 | 0.01 |
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:69:LEU:H | 21 | 0.01 |
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:69:LEU:H | 22 | 0.01 |
| (1,1332) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:69:LEU:H | 22 | 0.01 |
| (1,1328) | 1:A:68:LYS:HD2 | 1:A:65:THR:H | 2 | 0.01 |
| (1,1328) | 1:A:68:LYS:HD3 | 1:A:65:THR:H | 2 | 0.01 |
| (1,1311) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:68:LYS:HD2 | 16 | 0.01 |
| (1,1311) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:68:LYS:HD3 | 16 | 0.01 |
| (1,1308) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:63:GLN:HE21 | 10 | 0.01 |
| (1,1308) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:63:GLN:HE21 | 21 | 0.01 |
| (1,1308) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:63:GLN:HE21 | 24 | 0.01 |
| (1,1308) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:63:GLN:HE21 | 26 | 0.01 |
| (1,1302) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:31:LEU:HB3 | 14 | 0.01 |
| (1,1302) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:31:LEU:HB3 | 27 | 0.01 |
| (1,1274) | 1:A:62:ARG:HA | 1:A:63:GLN:HE22 | 2 | 0.01 |
| (1,1267) | 1:A:61:VAL:HG21 | 1:A:60:GLU:HB3 | 8 | 0.01 |
| (1,1267) | 1:A:61:VAL:HG22 | 1:A:60:GLU:HB3 | 8 | 0.01 |
| (1,1267) | 1:A:61:VAL:HG23 | 1:A:60:GLU:HB3 | 8 | 0.01 |
| (1,1267) | 1:A:61:VAL:HG21 | 1:A:60:GLU:HB3 | 27 | 0.01 |
| (1,1267) | 1:A:61:VAL:HG22 | 1:A:60:GLU:HB3 | 27 | 0.01 |
| (1,1267) | 1:A:61:VAL:HG23 | 1:A:60:GLU:HB3 | 27 | 0.01 |
| (1,1252) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:63:GLN:HE22 | 6 | 0.01 |
| (1,1252) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:63:GLN:HE22 | 10 | 0.01 |
| (1,1252) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:63:GLN:HE22 | 13 | 0.01 |
| (1,1252) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:63:GLN:HE22 | 21 | 0.01 |
| (1,1252) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:63:GLN:HE22 | 26 | 0.01 |
| (1,1252) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:63:GLN:HE22 | 28 | 0.01 |
| (1,1248) | 1:A:61:VAL:HA | 1:A:62:ARG:HB3 | 11 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1239) | 1:A:60:GLU:HB3 | 1:A:56:LEU:HB2 | 17 | 0.01 |
| (1,1239) | 1:A:60:GLU:HB3 | 1:A:56:LEU:HB2 | 21 | 0.01 |
| (1,1239) | 1:A:60:GLU:HB3 | 1:A:56:LEU:HB2 | 27 | 0.01 |
| (1,1222) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:63:GLN:HE22 | 21 | 0.01 |
| (1,1222) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:63:GLN:HE22 | 21 | 0.01 |
| (1,1222) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:63:GLN:HE22 | 21 | 0.01 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:57:PRO:HB3 | 13 | 0.01 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:57:PRO:HB3 | 13 | 0.01 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:57:PRO:HB3 | 13 | 0.01 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:57:PRO:HB3 | 27 | 0.01 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:57:PRO:HB3 | 27 | 0.01 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:57:PRO:HB3 | 27 | 0.01 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:57:PRO:HB3 | 29 | 0.01 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:57:PRO:HB3 | 29 | 0.01 |
| (1,1221) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:57:PRO:HB3 | 29 | 0.01 |
| (1,1220) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:ARG:HD2 | 17 | 0.01 |
| (1,1220) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:ARG:HD2 | 17 | 0.01 |
| (1,1220) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:ARG:HD2 | 17 | 0.01 |
| (1,1219) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:59:ARG:HD2 | 19 | 0.01 |
| (1,1219) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:59:ARG:HD3 | 19 | 0.01 |
| (1,1219) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:59:ARG:HD2 | 19 | 0.01 |
| (1,1219) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:59:ARG:HD3 | 19 | 0.01 |
| (1,1219) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:59:ARG:HD2 | 19 | 0.01 |
| (1,1219) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:59:ARG:HD3 | 19 | 0.01 |
| (1,1203) | 1:A:56:LEU:HD21 | 1:A:54:LEU:HA | 14 | 0.01 |
| (1,1203) | 1:A:56:LEU:HD22 | 1:A:54:LEU:HA | 14 | 0.01 |
| (1,1203) | 1:A:56:LEU:HD23 | 1:A:54:LEU:HA | 14 | 0.01 |
| (1,1184) | 1:A:56:LEU:HB3 | 1:A:57:PRO:HG3 | 29 | 0.01 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HB2 | 3 | 0.01 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HG2 | 3 | 0.01 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HB2 | 17 | 0.01 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HG2 | 17 | 0.01 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HB2 | 20 | 0.01 |
| (1,1183) | 1:A:56:LEU:HB2 | 1:A:57:PRO:HG2 | 20 | 0.01 |
| (1,1172) | 1:A:55:VAL:HA | 1:A:57:PRO:HG3 | 15 | 0.01 |
| (1,1172) | 1:A:55:VAL:HA | 1:A:57:PRO:HG3 | 25 | 0.01 |
| (1,1172) | 1:A:55:VAL:HA | 1:A:57:PRO:HG3 | 30 | 0.01 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD21 | 3 | 0.01 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD22 | 3 | 0.01 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD23 | 3 | 0.01 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD21 | 10 | 0.01 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD22 | 10 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD23 | 10 | 0.01 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD21 | 13 | 0.01 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD22 | 13 | 0.01 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD23 | 13 | 0.01 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD21 | 18 | 0.01 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD22 | 18 | 0.01 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD23 | 18 | 0.01 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD21 | 19 | 0.01 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD22 | 19 | 0.01 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD23 | 19 | 0.01 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD21 | 27 | 0.01 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD22 | 27 | 0.01 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD23 | 27 | 0.01 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD21 | 28 | 0.01 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD22 | 28 | 0.01 |
| (1,1168) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:56:LEU:HD23 | 28 | 0.01 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:51:GLU:HB2 | 17 | 0.01 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:51:GLU:HB2 | 17 | 0.01 |
| (1,1163) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:51:GLU:HB2 | 17 | 0.01 |
| (1,1162) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:52:HIS:HB2 | 1 | 0.01 |
| (1,1162) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:52:HIS:HB2 | 1 | 0.01 |
| (1,1162) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:52:HIS:HB2 | 1 | 0.01 |
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:52:HIS:HB3 | 3 | 0.01 |
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:52:HIS:HB3 | 3 | 0.01 |
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:52:HIS:HB3 | 3 | 0.01 |
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:52:HIS:HB3 | 6 | 0.01 |
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:52:HIS:HB3 | 6 | 0.01 |
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:52:HIS:HB3 | 6 | 0.01 |
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:52:HIS:HB3 | 7 | 0.01 |
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:52:HIS:HB3 | 7 | 0.01 |
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:52:HIS:HB3 | 7 | 0.01 |
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:52:HIS:HB3 | 10 | 0.01 |
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:52:HIS:HB3 | 10 | 0.01 |
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:52:HIS:HB3 | 10 | 0.01 |
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:52:HIS:HB3 | 11 | 0.01 |
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:52:HIS:HB3 | 11 | 0.01 |
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:52:HIS:HB3 | 11 | 0.01 |
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:52:HIS:HB3 | 28 | 0.01 |
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:52:HIS:HB3 | 28 | 0.01 |
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:52:HIS:HB3 | 28 | 0.01 |
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:52:HIS:HB3 | 30 | 0.01 |
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:52:HIS:HB3 | 30 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1161) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:52:HIS:HB3 | 30 | 0.01 |
| (1,1158) | 1:A:54:LEU:HB3 | 1:A:48:LEU:HB3 | 2 | 0.01 |
| (1,1147) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:48:LEU:HB3 | 7 | 0.01 |
| (1,1147) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:48:LEU:HB3 | 9 | 0.01 |
| (1,1147) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:48:LEU:HB3 | 25 | 0.01 |
| (1,111) | 1:A:55:VAL:HG21 | 1:A:49:GLU:HG3 | 9 | 0.01 |
| (1,111) | 1:A:55:VAL:HG22 | 1:A:49:GLU:HG3 | 9 | 0.01 |
| (1,111) | 1:A:55:VAL:HG23 | 1:A:49:GLU:HG3 | 9 | 0.01 |
| (1,1108) | 1:A:48:LEU:HA | 1:A:52:HIS:HB3 | 9 | 0.01 |
| (1,1108) | 1:A:48:LEU:HA | 1:A:52:HIS:HB3 | 12 | 0.01 |
| (1,1108) | 1:A:48:LEU:HA | 1:A:52:HIS:HB3 | 23 | 0.01 |
| (1,1103) | 1:A:40:MET:HG3 | 1:A:40:MET:H | 19 | 0.01 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD21 | 1:A:42:VAL:H | 10 | 0.01 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD22 | 1:A:42:VAL:H | 10 | 0.01 |
| (1,1095) | 1:A:39:LEU:HD23 | 1:A:42:VAL:H | 10 | 0.01 |
| (1,1071) | 1:A:36:LEU:HG | 1:A:38:SER:H | 11 | 0.01 |
| (1,1071) | 1:A:36:LEU:HG | 1:A:38:SER:H | 15 | 0.01 |
| (1,1071) | 1:A:36:LEU:HG | 1:A:38:SER:H | 17 | 0.01 |
| (1,1064) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:42:VAL:H | 3 | 0.01 |
| (1,1064) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:42:VAL:H | 3 | 0.01 |
| (1,1064) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:42:VAL:H | 3 | 0.01 |
| (1,1061) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:38:SER:H | 1 | 0.01 |
| (1,1061) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:38:SER:H | 1 | 0.01 |
| (1,1061) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:38:SER:H | 1 | 0.01 |
| (1,1056) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:62:ARG:HA | 10 | 0.01 |
| (1,1056) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:62:ARG:HA | 10 | 0.01 |
| (1,1056) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:62:ARG:HA | 10 | 0.01 |
| (1,1056) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:62:ARG:HA | 12 | 0.01 |
| (1,1056) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:62:ARG:HA | 12 | 0.01 |
| (1,1056) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:62:ARG:HA | 12 | 0.01 |
| (1,1052) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:41:GLY:HA2 | 11 | 0.01 |
| (1,1052) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:41:GLY:HA2 | 11 | 0.01 |
| (1,1052) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:41:GLY:HA2 | 11 | 0.01 |
| (1,1052) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:41:GLY:HA2 | 18 | 0.01 |
| (1,1052) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:41:GLY:HA2 | 18 | 0.01 |
| (1,1052) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:41:GLY:HA2 | 18 | 0.01 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG21 | 6 | 0.01 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG22 | 6 | 0.01 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:44:VAL:HG23 | 6 | 0.01 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG21 | 6 | 0.01 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG22 | 6 | 0.01 |
| (1,1050) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:44:VAL:HG23 | 6 | 0.01 |



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

| (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 6 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 6 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 6 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG22 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU: | |
|--|--|
| (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 6 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG22 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG23 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG23 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LE | |
| (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG22 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG23 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:L | |
| (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG22 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG23 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:L | |
| (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG23 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:L | |
| (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:L | |
| (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:L | |
| (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1047) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:44:VAL:HG21 26 0.01 | |
| (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG22 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1047) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 | |
| (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG22 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1047) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:44:VAL:HG21 26 0.01 | |
| (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 11 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG22 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1047) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 | |
| (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG22 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1047) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:44:VAL:HG21 26 0.01 | |
| (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG22 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1047) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:44:VAL:HG21 26 0.01 | |
| (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1047) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:44:VAL:HG21 26 0.01 | |
| (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1047) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:44:VAL:HG21 26 0.01 | |
| (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1047) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:44:VAL:HG21 26 0.01 | |
| (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1047) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:44:VAL:HG21 26 0.01 | |
| (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1047) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:44:VAL:HG21 26 0.01 | |
| (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 17 0.01 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1047) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:44:VAL:HG21 26 0.01 | |
| (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 17 0.01 (1,1047) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:44:VAL:HG21 26 0.01 | |
| (1,1047) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:44:VAL:HG21 26 0.01 | |
| | |
| | |
| (1,1047) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:44:VAL:HG22 26 0.01 | |
| (1,1047) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:44:VAL:HG23 26 0.01 | |
| (1,1047) 1:A:36:LEU:HD22 1:A:44:VAL:HG21 26 0.01 | |
| (1,1047) 1:A:36:LEU:HD22 1:A:44:VAL:HG22 26 0.01 | |
| (1,1047) 1:A:36:LEU:HD22 1:A:44:VAL:HG23 26 0.01 | |
| (1,1047) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:44:VAL:HG21 26 0.01 | |
| (1,1047) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:44:VAL:HG22 26 0.01 | |
| (1,1047) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:44:VAL:HG23 26 0.01 | |
| (1,1037) 1:A:36:LEU:HB3 1:A:40:MET:HA 7 0.01 | |
| (1,1037) 1:A:36:LEU:HB3 1:A:40:MET:HA 23 0.01 | |
| (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 2 0.01 | |
| (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 2 0.01 | |
| (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 2 0.01 | |
| (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 7 0.01 | |
| (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 7 0.01 | |
| (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 7 0.01 | |
| (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 8 0.01 | |
| (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 8 0.01 | |
| (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 8 0.01 | |
| (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 11 0.01 | |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|-------|---------------|
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:H | 11 | 0.01 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:H | 11 | 0.01 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:H | 18 | 0.01 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:H | 18 | 0.01 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:H | 18 | 0.01 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:33:ASP:H | 22 | 0.01 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:33:ASP:H | 22 | 0.01 |
| (1,1028) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:33:ASP:H | 22 | 0.01 |
| (1,1009) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:29:SER:HB2 | 8 | 0.01 |
| (1,1009) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:29:SER:HB2 | 8 | 0.01 |
| (1,1009) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:29:SER:HB2 | 8 | 0.01 |
| (1,1009) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:29:SER:HB2 | 11 | 0.01 |
| (1,1009) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:29:SER:HB2 | 11 | 0.01 |
| (1,1009) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:29:SER:HB2 | 11 | 0.01 |
| (1,1009) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:29:SER:HB2 | 15 | 0.01 |
| (1,1009) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:29:SER:HB2 | 15 | 0.01 |
| (1,1009) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:29:SER:HB2 | 15 | 0.01 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:31:LEU:HA | 10 | 0.01 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:31:LEU:HA | 10 | 0.01 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:31:LEU:HA | 10 | 0.01 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:31:LEU:HA | 15 | 0.01 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:31:LEU:HA | 15 | 0.01 |
| (1,1008) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:31:LEU:HA | 15 | 0.01 |
| (1,1005) | 1:A:33:ASP:HB3 | 1:A:30:SER:H | 2 | 0.01 |
| (1,1005) | 1:A:33:ASP:HB3 | 1:A:30:SER:H | 3 | 0.01 |
| (1,1000) | 1:A:33:ASP:HB2 | 1:A:35:GLY:H | 7 | 0.01 |



9 Dihedral angle restraints analysis

No dihedral angle restraints found

