



wwPDB EM Map/Model Validation Report ⓘ

Apr 10, 2016 – 01:41 PM BST

PDB ID : 3J3I
EMDB ID: : EMD-5600
Title : Penicillium chrysogenum virus (PcV) capsid structure
Authors : Luque, D.; Gomez-Blanco, J.; Garriga, D.; Brilot, A.; Gonzalez, J.M.; Havens, W.H.; Carrascosa, J.L.; Trus, B.L.; Verdaguer, N.; Grigorieff, N.; Ghabrial, S.A.; Caston, J.R.
Deposited on : 2013-03-08
Resolution : 4.10 Å(reported)

This is a wwPDB EM Map/Model Validation Report for a publicly released PDB/EMDB entry.
For rigid body fitted models, validation errors reported here could stem from errors in the original structure(s) used in the fitting.

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

A user guide is available at

<http://wwpdb.org/validation/2016/EMValidationReportHelp>

MolProbity : 4.02b-467
Mogul : unknown
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et. al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : trunk27241

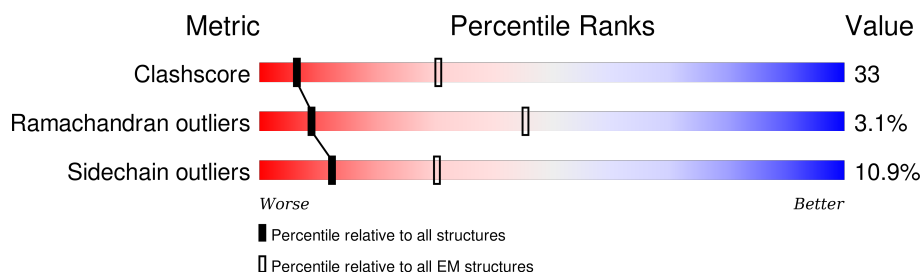
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

ELECTRON MICROSCOPY

The reported resolution of this entry is 4.10 Å.

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 (#Entries)	EM structures (#Entries)
Clashscore	114402	924
Ramachandran outliers	111179	726
Sidechain outliers	111093	686

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains. The red, orange, yellow and green segments on the bar indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. 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 $\leq 5\%$

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	982	

2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 7515 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

In the tables below, the AltConf column contains the number of residues with at least one atom in alternate conformation and the Trace column contains the number of residues modelled with at most 2 atoms.

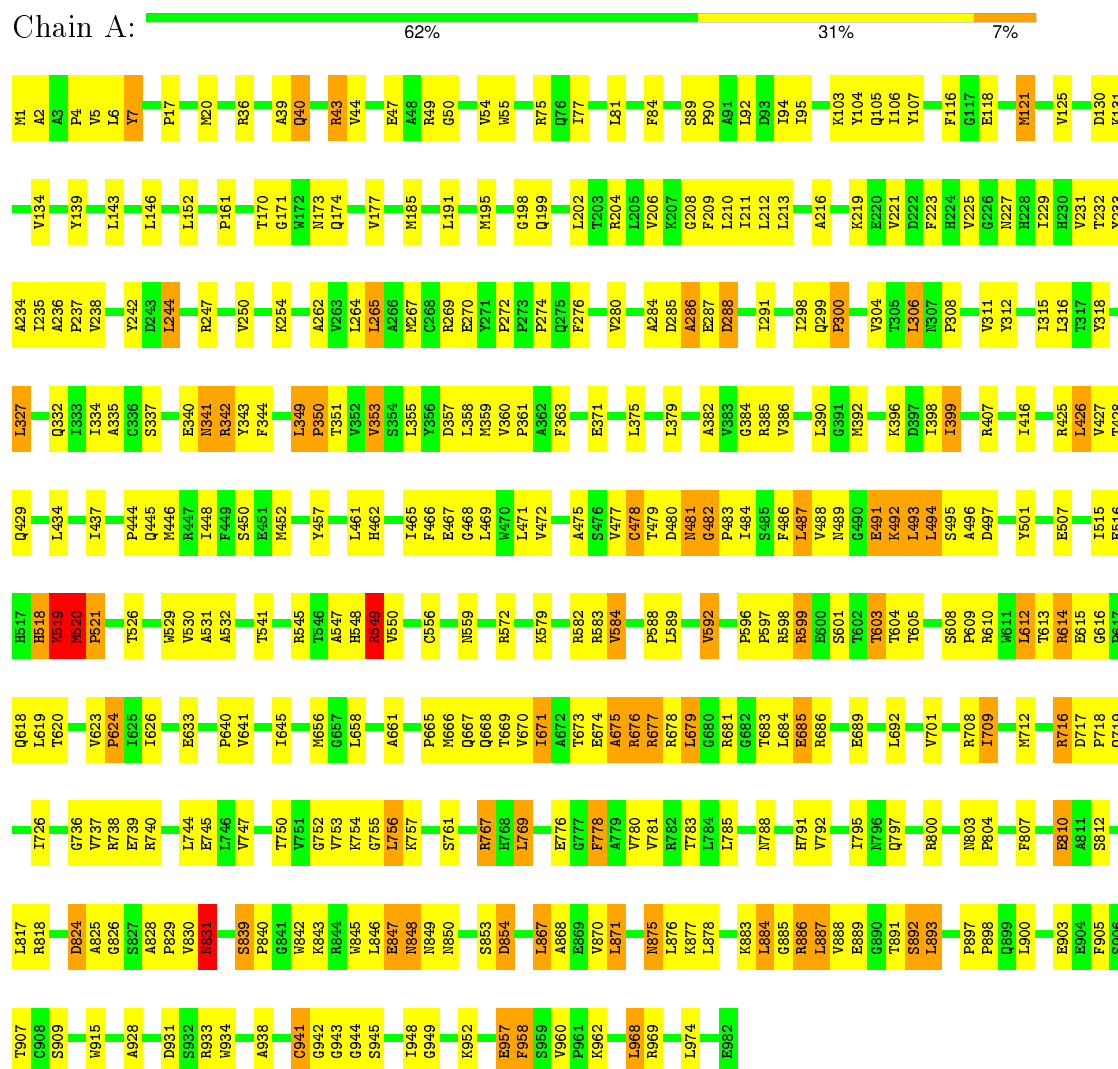
- Molecule 1 is a protein called Capsid protein.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S		
1	A	982	7515	4685	1369	1417	44	0	17

3 Residue-property plots

These plots are drawn for all protein, RNA and DNA chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of errors displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry. Residues are color-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 outlier are shown as a green connector. Residues present in the sample, but not in the model, are shown in grey.

- Molecule 1: Capsid protein



4 Experimental information

Property	Value	Source
Reconstruction method	SINGLE PARTICLE	Depositor
Imposed symmetry	POINT, 1	Depositor
Number of images	27566	Depositor
Resolution determination method	FSC at 0.143 cut-off	Depositor
CTF correction method	Phase flipping & amplitude	Depositor
Microscope	FEI TECNAI F30	Depositor
Voltage (kV)	300	Depositor
Electron dose ($e^-/\text{\AA}^2$)	25	Depositor
Minimum defocus (nm)	1100	Depositor
Maximum defocus (nm)	3800	Depositor
Magnification	58333	Depositor
Image detector	Kodak SO163 film	Depositor

5 Model quality [i](#)

5.1 Standard geometry [i](#)

The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 5$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 2$	RMSZ	$\# Z > 2$
1	A	0.31	1/7638 (0.0%)	0.52	1/10318 (0.0%)

All (1) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	521	PRO	N-CD	5.33	1.55	1.47

All (1) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	482	GLY	N-CA-C	5.21	126.14	113.10

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

5.2 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 the 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 within the asymmetric unit, whereas Symm-Clashes lists symmetry related clashes.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	7515	0	7478	491	0
All	All	7515	0	7478	491	0

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 33.

All (491) close contacts within the same asymmetric unit are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:507:GLU:CA	1:A:626:ILE:HG23	1.23	1.61
1:A:610:ARG:CZ	1:A:674:GLU:CG	1.79	1.60
1:A:94:ILE:CD1	1:A:496:ALA:HB1	1.39	1.53
1:A:5:VAL:HG21	1:A:17:PRO:CB	1.39	1.52
1:A:610:ARG:NH2	1:A:674:GLU:HG2	1.19	1.50
1:A:610:ARG:NH2	1:A:674:GLU:CG	1.73	1.46
1:A:104:TYR:HA	1:A:493:LEU:CD2	0.96	1.44
1:A:94:ILE:HD13	1:A:496:ALA:CB	1.45	1.42
1:A:104:TYR:CA	1:A:493:LEU:HD21	0.95	1.41
1:A:5:VAL:CG2	1:A:17:PRO:HB3	1.46	1.41
1:A:907:THR:CG2	1:A:943:GLY:HA3	1.51	1.40
1:A:887:LEU:CB	1:A:900:LEU:HD21	1.50	1.37
1:A:94:ILE:CD1	1:A:496:ALA:CB	1.99	1.35
1:A:5:VAL:HG21	1:A:17:PRO:CA	1.56	1.33
1:A:507:GLU:CA	1:A:626:ILE:CG2	2.08	1.29
1:A:610:ARG:CZ	1:A:674:GLU:HG2	1.43	1.28
1:A:610:ARG:CZ	1:A:674:GLU:HG3	1.50	1.28
1:A:887:LEU:HB3	1:A:900:LEU:CD2	1.64	1.28
1:A:103:LYS:O	1:A:493:LEU:CG	1.84	1.24
1:A:550:VAL:CG1	1:A:752:GLY:O	1.85	1.24
1:A:520:MET:CE	1:A:541:THR:HG22	1.67	1.23
1:A:103:LYS:O	1:A:493:LEU:HG	1.31	1.22
1:A:520:MET:CE	1:A:541:THR:CG2	2.19	1.20
1:A:712:MET:HG3	1:A:781:VAL:CG1	1.72	1.20
1:A:618:GLN:HG3	1:A:678:ARG:HB3	1.21	1.17
1:A:426:LEU:HD12	1:A:427:VAL:HG23	1.24	1.17
1:A:4:PRO:HG3	1:A:20:MET:CB	1.74	1.16
1:A:4:PRO:CG	1:A:20:MET:HB2	1.75	1.16
1:A:907:THR:CG2	1:A:943:GLY:CA	2.23	1.15
1:A:495:SER:OG	1:A:849:ASN:ND2	1.80	1.14
1:A:118:GLU:OE2	1:A:484:ILE:HG21	1.46	1.13
1:A:610:ARG:NH1	1:A:674:GLU:OE2	1.80	1.13
1:A:4:PRO:HG3	1:A:20:MET:HB2	1.12	1.12
1:A:103:LYS:O	1:A:493:LEU:CD1	1.99	1.11
1:A:550:VAL:HG13	1:A:752:GLY:O	0.93	1.10
1:A:487:LEU:HD12	1:A:488:VAL:H	1.11	1.09
1:A:610:ARG:NH1	1:A:674:GLU:CG	2.12	1.09
1:A:5:VAL:CG2	1:A:17:PRO:CB	2.12	1.09
1:A:907:THR:HG21	1:A:943:GLY:HA3	1.10	1.09
1:A:104:TYR:HA	1:A:493:LEU:HD23	1.34	1.08
1:A:520:MET:HE2	1:A:541:THR:HG21	1.31	1.07
1:A:103:LYS:C	1:A:493:LEU:HD11	1.74	1.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:520:MET:HE3	1:A:541:THR:CG2	1.82	1.06
1:A:520:MET:HE2	1:A:541:THR:CG2	1.81	1.05
1:A:107:TYR:HE2	1:A:491:GLU:HG3	1.17	1.05
1:A:712:MET:CG	1:A:781:VAL:HG13	1.86	1.04
1:A:610:ARG:NH1	1:A:674:GLU:HG2	1.68	1.03
1:A:547:ALA:O	1:A:548:HIS:ND1	1.92	1.03
1:A:957:GLU:HG2	1:A:958:PHE:N	1.74	1.02
1:A:520:MET:HE3	1:A:541:THR:HG22	1.04	1.02
1:A:518:HIS:O	1:A:519:LYS:HB2	1.58	1.02
1:A:550:VAL:HG13	1:A:752:GLY:C	1.81	1.01
1:A:487:LEU:HD12	1:A:488:VAL:N	1.74	1.01
1:A:118:GLU:OE2	1:A:484:ILE:CG2	2.08	1.00
1:A:94:ILE:CD1	1:A:496:ALA:HB3	1.90	0.99
1:A:907:THR:HG22	1:A:943:GLY:CA	1.89	0.99
1:A:340:GLU:HG2	1:A:343:TYR:HB2	1.40	0.99
1:A:94:ILE:HD12	1:A:496:ALA:CB	1.91	0.99
1:A:355:LEU:HD21	1:A:358:LEU:HD12	1.46	0.98
1:A:887:LEU:CB	1:A:900:LEU:CD2	2.31	0.98
1:A:4:PRO:HG3	1:A:20:MET:CG	1.93	0.97
1:A:5:VAL:HG21	1:A:17:PRO:HA	1.46	0.97
1:A:5:VAL:CG2	1:A:17:PRO:CA	2.40	0.97
1:A:107:TYR:CE2	1:A:491:GLU:HG3	2.00	0.96
1:A:104:TYR:C	1:A:493:LEU:HD21	1.87	0.95
1:A:487:LEU:CD1	1:A:488:VAL:H	1.80	0.95
1:A:907:THR:HG22	1:A:943:GLY:HA3	1.42	0.95
1:A:5:VAL:HG21	1:A:17:PRO:HB3	1.02	0.95
1:A:584:VAL:HG13	1:A:645:ILE:HD13	1.47	0.94
1:A:712:MET:HG3	1:A:781:VAL:HG13	0.92	0.92
1:A:94:ILE:HD13	1:A:496:ALA:HB3	1.50	0.92
1:A:828:ALA:HB3	1:A:829:PRO:HD3	1.52	0.91
1:A:94:ILE:HD13	1:A:496:ALA:HB1	0.97	0.91
1:A:668:GLN:O	1:A:671:ILE:HG22	1.71	0.91
1:A:610:ARG:NH1	1:A:674:GLU:CD	2.23	0.91
1:A:104:TYR:N	1:A:493:LEU:HD21	1.86	0.90
1:A:778:PHE:HD2	1:A:780:VAL:HG22	1.33	0.90
1:A:5:VAL:HG22	1:A:17:PRO:HB3	1.53	0.90
1:A:618:GLN:CG	1:A:678:ARG:HB3	2.02	0.89
1:A:675:ALA:HB1	1:A:684:LEU:HG	1.53	0.89
1:A:94:ILE:HD11	1:A:496:ALA:HB1	1.56	0.88
1:A:584:VAL:HG22	1:A:645:ILE:HB	1.52	0.88
1:A:610:ARG:HH22	1:A:674:GLU:HG2	1.06	0.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:614:ARG:NE	1:A:677:ARG:O	2.08	0.86
1:A:481:ASN:C	1:A:483:PRO:HD2	1.96	0.86
1:A:712:MET:CE	1:A:781:VAL:HG22	2.06	0.85
1:A:548:HIS:O	1:A:549:ARG:NH2	2.09	0.85
1:A:5:VAL:CG2	1:A:17:PRO:HA	2.02	0.85
1:A:103:LYS:O	1:A:493:LEU:HD11	1.73	0.84
1:A:426:LEU:CD1	1:A:427:VAL:HG23	2.05	0.84
1:A:519:LYS:O	1:A:520:MET:HB2	1.77	0.84
1:A:907:THR:HG21	1:A:943:GLY:CA	2.01	0.84
1:A:515:ILE:CA	1:A:516:GLU:N	2.40	0.84
1:A:493:LEU:CB	1:A:824:ASP:OD2	2.26	0.83
1:A:712:MET:HE2	1:A:781:VAL:CG2	2.09	0.83
1:A:907:THR:HB	1:A:943:GLY:HA2	1.61	0.83
1:A:225:VAL:HG13	1:A:265:LEU:HD12	1.59	0.82
1:A:521:PRO:HB3	1:A:952:LYS:HZ1	1.45	0.82
1:A:521:PRO:HB2	1:A:952:LYS:HZ2	1.45	0.81
1:A:121:MET:CE	1:A:481:ASN:O	2.29	0.81
1:A:883:LYS:HG2	1:A:943:GLY:O	1.81	0.81
1:A:493:LEU:HB2	1:A:824:ASP:OD2	1.80	0.80
1:A:104:TYR:HA	1:A:493:LEU:CG	2.10	0.80
1:A:529:TRP:HZ3	1:A:941:CYS:O	1.65	0.80
1:A:887:LEU:HB3	1:A:900:LEU:HD21	0.80	0.80
1:A:610:ARG:NH2	1:A:674:GLU:CB	2.44	0.80
1:A:610:ARG:NE	1:A:674:GLU:HG3	1.98	0.79
1:A:529:TRP:HB2	1:A:944:GLY:O	1.83	0.78
1:A:426:LEU:HD12	1:A:427:VAL:CG2	2.10	0.78
1:A:615:GLU:CD	1:A:678:ARG:HE	1.87	0.78
1:A:549:ARG:CB	1:A:686:ARG:H	1.97	0.76
1:A:675:ALA:HB1	1:A:684:LEU:CG	2.15	0.76
1:A:529:TRP:HH2	1:A:938:ALA:CB	1.99	0.76
1:A:885:GLY:C	1:A:886:ARG:HG3	2.05	0.76
1:A:887:LEU:CA	1:A:900:LEU:HD21	2.16	0.75
1:A:480:ASP:O	1:A:481:ASN:HB2	1.85	0.75
1:A:231:VAL:HG12	1:A:232:THR:HG23	1.67	0.74
1:A:518:HIS:O	1:A:519:LYS:CB	2.36	0.74
1:A:529:TRP:CB	1:A:944:GLY:O	2.35	0.74
1:A:209:PHE:HB3	1:A:334:ILE:HD13	1.70	0.73
1:A:521:PRO:CB	1:A:952:LYS:NZ	2.52	0.73
1:A:121:MET:HE3	1:A:481:ASN:O	1.88	0.73
1:A:461:LEU:HB3	1:A:471:LEU:HD22	1.70	0.73
1:A:468:GLY:O	1:A:472:VAL:HG23	1.89	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:778:PHE:CE2	1:A:781:VAL:HG23	2.24	0.72
1:A:94:ILE:HG21	1:A:496:ALA:HB3	1.71	0.72
1:A:104:TYR:CA	1:A:493:LEU:CD2	1.87	0.72
1:A:545:ARG:HB3	1:A:745:GLU:HG2	1.70	0.72
1:A:618:GLN:HG3	1:A:678:ARG:CB	2.11	0.72
1:A:427:VAL:HG12	1:A:428:THR:H	1.55	0.71
1:A:957:GLU:CG	1:A:958:PHE:N	2.50	0.71
1:A:614:ARG:NH2	1:A:679:LEU:O	2.23	0.71
1:A:907:THR:CB	1:A:943:GLY:HA2	2.21	0.71
1:A:501:TYR:CA	1:A:549:ARG:HH12	2.03	0.71
1:A:104:TYR:C	1:A:493:LEU:CD2	2.51	0.70
1:A:550:VAL:HG11	1:A:753:VAL:HA	1.73	0.70
1:A:817:LEU:HD12	1:A:818:ARG:N	2.06	0.70
1:A:519:LYS:NZ	1:A:679:LEU:HD11	2.07	0.70
1:A:482:GLY:N	1:A:483:PRO:HD2	2.06	0.70
1:A:671:ILE:HA	1:A:689:GLU:OE1	1.92	0.70
1:A:482:GLY:N	1:A:483:PRO:CD	2.54	0.70
1:A:550:VAL:CG1	1:A:753:VAL:HA	2.22	0.69
1:A:75:ARG:NH1	1:A:559:ASN:O	2.24	0.69
1:A:519:LYS:HE3	1:A:679:LEU:HD11	1.74	0.69
1:A:549:ARG:HG3	1:A:686:ARG:CB	2.20	0.69
1:A:883:LYS:HG2	1:A:944:GLY:HA2	1.73	0.69
1:A:739:GLU:HB3	1:A:792:VAL:HG21	1.73	0.68
1:A:5:VAL:CB	1:A:17:PRO:HB3	2.22	0.68
1:A:121:MET:HE1	1:A:481:ASN:O	1.92	0.68
1:A:907:THR:CG2	1:A:943:GLY:HA2	2.20	0.68
1:A:5:VAL:HG22	1:A:17:PRO:CB	2.13	0.68
1:A:549:ARG:HB2	1:A:686:ARG:H	1.56	0.68
1:A:548:HIS:CD2	1:A:549:ARG:H	2.12	0.67
1:A:521:PRO:HB2	1:A:952:LYS:NZ	2.09	0.67
1:A:4:PRO:O	1:A:5:VAL:HG12	1.95	0.67
1:A:583:ARG:O	1:A:584:VAL:HG23	1.95	0.67
1:A:548:HIS:CG	1:A:549:ARG:H	2.12	0.67
1:A:519:LYS:CE	1:A:679:LEU:HD11	2.25	0.67
1:A:712:MET:HE2	1:A:781:VAL:HG21	1.75	0.67
1:A:5:VAL:CG1	1:A:17:PRO:HB3	2.25	0.67
1:A:778:PHE:CD2	1:A:780:VAL:HG22	2.22	0.66
1:A:792:VAL:HA	1:A:795:ILE:HD12	1.77	0.66
1:A:603:THR:HG22	1:A:757:LYS:O	1.95	0.66
1:A:671:ILE:HD13	1:A:671:ILE:C	2.16	0.66
1:A:661:ALA:HB1	1:A:701:VAL:HG11	1.78	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:891:THR:O	1:A:892:SER:C	2.33	0.66
1:A:887:LEU:HB3	1:A:900:LEU:CG	2.25	0.65
1:A:712:MET:SD	1:A:781:VAL:HG22	2.36	0.65
1:A:340:GLU:HG2	1:A:343:TYR:CB	2.22	0.65
1:A:675:ALA:HB1	1:A:684:LEU:CD1	2.26	0.65
1:A:4:PRO:HG3	1:A:20:MET:HG3	1.78	0.65
1:A:610:ARG:HH12	1:A:674:GLU:HG2	1.59	0.65
1:A:493:LEU:HG	1:A:493:LEU:O	1.95	0.64
1:A:529:TRP:CZ3	1:A:941:CYS:O	2.49	0.64
1:A:676:ARG:H	1:A:684:LEU:HD21	1.63	0.64
1:A:668:GLN:O	1:A:671:ILE:CG2	2.43	0.64
1:A:477:VAL:O	1:A:478:CYS:HB2	1.95	0.64
1:A:210:LEU:HD21	1:A:337:SER:HB3	1.80	0.64
1:A:549:ARG:HB3	1:A:686:ARG:H	1.63	0.63
1:A:521:PRO:HB3	1:A:952:LYS:NZ	2.12	0.63
1:A:469:LEU:N	1:A:488:VAL:HG21	2.13	0.63
1:A:204:ARG:NH2	1:A:353:VAL:HG11	2.13	0.63
1:A:492:LYS:HE2	1:A:494:LEU:HD21	1.79	0.63
1:A:791:HIS:CE1	1:A:795:ILE:HD11	2.33	0.62
1:A:223:PHE:CE2	1:A:306:LEU:HD21	2.33	0.62
1:A:235:ILE:O	1:A:238:VAL:HG12	2.00	0.62
1:A:398:ILE:HG12	1:A:416:ILE:HD13	1.82	0.62
1:A:887:LEU:HB2	1:A:900:LEU:CD2	2.27	0.62
1:A:209:PHE:CB	1:A:334:ILE:HG21	2.30	0.62
1:A:530:VAL:HG22	1:A:531:ALA:H	1.65	0.61
1:A:390:LEU:HD22	1:A:429:GLN:HE21	1.65	0.61
1:A:907:THR:CB	1:A:943:GLY:CA	2.76	0.61
1:A:495:SER:HG	1:A:849:ASN:ND2	1.99	0.61
1:A:106:ILE:HG23	1:A:489:ASN:O	2.01	0.61
1:A:548:HIS:O	1:A:549:ARG:HD2	2.00	0.61
1:A:549:ARG:HB2	1:A:686:ARG:N	2.16	0.60
1:A:493:LEU:HB3	1:A:824:ASP:OD2	2.01	0.60
1:A:674:GLU:OE1	1:A:685:GLU:O	2.18	0.60
1:A:928:ALA:HB1	1:A:931:ASP:HB2	1.84	0.60
1:A:614:ARG:NH2	1:A:684:LEU:HD13	2.16	0.60
1:A:103:LYS:HB3	1:A:493:LEU:HD11	1.83	0.60
1:A:670:VAL:HG22	1:A:689:GLU:OE2	2.01	0.60
1:A:335:ALA:HB1	1:A:384:GLY:CA	2.32	0.60
1:A:767:ARG:CG	1:A:769:LEU:HD11	2.31	0.60
1:A:797:GLN:HE22	1:A:868:ALA:HB3	1.67	0.60
1:A:957:GLU:HG2	1:A:958:PHE:H	1.65	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:355:LEU:CD2	1:A:358:LEU:HD12	2.27	0.60
1:A:610:ARG:NH2	1:A:674:GLU:HG3	1.73	0.59
1:A:94:ILE:HD12	1:A:496:ALA:HB3	1.64	0.59
1:A:171:GLY:HA3	1:A:234:ALA:HB3	1.83	0.59
1:A:5:VAL:HG13	1:A:5:VAL:O	2.02	0.59
1:A:105:GLN:HG2	1:A:493:LEU:HD22	1.83	0.59
1:A:778:PHE:HD2	1:A:780:VAL:CG2	2.11	0.59
1:A:105:GLN:N	1:A:493:LEU:CD2	2.65	0.59
1:A:466:PHE:HD1	1:A:487:LEU:HA	1.68	0.59
1:A:767:ARG:HG3	1:A:769:LEU:HD11	1.84	0.59
1:A:118:GLU:OE2	1:A:484:ILE:HG22	2.00	0.59
1:A:719:GLN:HG2	1:A:726:ILE:HD12	1.84	0.59
1:A:903:GLU:O	1:A:907:THR:HG23	2.03	0.58
1:A:94:ILE:HD12	1:A:496:ALA:C	2.23	0.58
1:A:47:GLU:OE2	1:A:49:ARG:N	2.32	0.58
1:A:549:ARG:CB	1:A:686:ARG:N	2.66	0.58
1:A:886:ARG:O	1:A:887:LEU:HD22	2.04	0.58
1:A:462:HIS:O	1:A:488:VAL:HG12	2.02	0.58
1:A:233:TYR:CD1	1:A:361:PRO:HG3	2.39	0.58
1:A:752:GLY:HA2	1:A:846:LEU:HD13	1.85	0.58
1:A:4:PRO:CD	1:A:20:MET:HB2	2.32	0.58
1:A:778:PHE:CE2	1:A:781:VAL:CG2	2.86	0.58
1:A:235:ILE:HG22	1:A:236:ALA:H	1.67	0.58
1:A:958:PHE:O	1:A:960:VAL:HG23	2.04	0.58
1:A:529:TRP:HH2	1:A:938:ALA:HB1	1.69	0.58
1:A:605:THR:HB	1:A:726:ILE:HG23	1.86	0.58
1:A:5:VAL:CG2	1:A:17:PRO:CG	2.81	0.58
1:A:717:ASP:N	1:A:718:PRO:HD2	2.18	0.57
1:A:529:TRP:HB3	1:A:945:SER:HA	1.86	0.57
1:A:616:GLY:HA3	1:A:785:LEU:HD11	1.85	0.57
1:A:670:VAL:HG22	1:A:689:GLU:CD	2.25	0.57
1:A:213:LEU:HD11	1:A:375:LEU:HD23	1.85	0.57
1:A:89:SER:HA	1:A:825:ALA:HB1	1.86	0.57
1:A:105:GLN:N	1:A:493:LEU:HD22	2.20	0.57
1:A:778:PHE:CD2	1:A:781:VAL:HG23	2.39	0.57
1:A:173:ASN:HB2	1:A:235:ILE:HD12	1.85	0.57
1:A:579:LYS:CG	1:A:641:VAL:HG21	2.34	0.57
1:A:5:VAL:HG22	1:A:17:PRO:HG3	1.85	0.57
1:A:887:LEU:HD12	1:A:888:VAL:H	1.69	0.57
1:A:480:ASP:O	1:A:481:ASN:CB	2.50	0.57
1:A:529:TRP:HB3	1:A:944:GLY:O	2.05	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:778:PHE:N	1:A:778:PHE:CD1	2.73	0.56
1:A:77:ILE:HG21	1:A:556:CYS:SG	2.45	0.56
1:A:548:HIS:CG	1:A:549:ARG:N	2.73	0.56
1:A:579:LYS:CD	1:A:641:VAL:HG21	2.35	0.56
1:A:487:LEU:CG	1:A:488:VAL:H	2.18	0.56
1:A:883:LYS:CG	1:A:943:GLY:O	2.53	0.56
1:A:529:TRP:HH2	1:A:938:ALA:HB2	1.69	0.56
1:A:674:GLU:O	1:A:675:ALA:HB3	2.06	0.56
1:A:270:GLU:HG2	1:A:284:ALA:HB2	1.87	0.56
1:A:737:VAL:HG21	1:A:845:TRP:CE2	2.41	0.56
1:A:5:VAL:HG22	1:A:17:PRO:CG	2.34	0.55
1:A:612:LEU:HD23	1:A:712:MET:SD	2.46	0.55
1:A:675:ALA:CA	1:A:684:LEU:HD11	2.37	0.55
1:A:610:ARG:O	1:A:614:ARG:HB2	2.06	0.55
1:A:103:LYS:CB	1:A:493:LEU:HD11	2.36	0.55
1:A:604:THR:HG21	1:A:692:LEU:HD21	1.89	0.55
1:A:592:VAL:O	1:A:596:PRO:HD2	2.06	0.55
1:A:712:MET:CE	1:A:781:VAL:CG2	2.72	0.55
1:A:121:MET:HE1	1:A:481:ASN:C	2.27	0.55
1:A:716:ARG:NH1	1:A:776:GLU:OE1	2.40	0.55
1:A:826:GLY:O	1:A:830:VAL:HG21	2.07	0.54
1:A:316:LEU:HD12	1:A:589:LEU:CD2	2.37	0.54
1:A:5:VAL:HG23	1:A:17:PRO:HA	1.88	0.54
1:A:884:LEU:HD13	1:A:885:GLY:N	2.21	0.54
1:A:39:ALA:O	1:A:43:ARG:HG3	2.07	0.54
1:A:712:MET:CG	1:A:781:VAL:CG1	2.65	0.54
1:A:250:VAL:HG13	1:A:318:TYR:CE1	2.42	0.54
1:A:583:ARG:C	1:A:584:VAL:HG23	2.28	0.54
1:A:791:HIS:CD2	1:A:968:LEU:HD12	2.42	0.54
1:A:887:LEU:C	1:A:900:LEU:HD21	2.28	0.54
1:A:887:LEU:CD1	1:A:888:VAL:H	2.22	0.53
1:A:549:ARG:HG3	1:A:686:ARG:HB2	1.88	0.53
1:A:143:LEU:HD13	1:A:198:GLY:HA2	1.90	0.53
1:A:891:THR:O	1:A:893:LEU:N	2.41	0.53
1:A:675:ALA:HA	1:A:684:LEU:HD11	1.90	0.53
1:A:712:MET:HE1	1:A:778:PHE:CE2	2.44	0.53
1:A:519:LYS:HZ2	1:A:679:LEU:HD11	1.73	0.53
1:A:234:ALA:HA	1:A:238:VAL:HG11	1.91	0.53
1:A:604:THR:CG2	1:A:692:LEU:HD21	2.38	0.53
1:A:828:ALA:CB	1:A:829:PRO:HD3	2.34	0.52
1:A:584:VAL:HG13	1:A:645:ILE:CD1	2.32	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:84:PHE:CE1	1:A:92:LEU:HD11	2.44	0.52
1:A:519:LYS:O	1:A:520:MET:CB	2.56	0.52
1:A:327:LEU:HD12	1:A:371:GLU:HB3	1.92	0.52
1:A:616:GLY:O	1:A:620:THR:HG23	2.10	0.52
1:A:81:LEU:HD21	1:A:379:LEU:HD21	1.92	0.52
1:A:618:GLN:NE2	1:A:678:ARG:O	2.42	0.52
1:A:817:LEU:HD12	1:A:818:ARG:H	1.74	0.52
1:A:675:ALA:CB	1:A:684:LEU:CD1	2.87	0.52
1:A:360:VAL:O	1:A:360:VAL:HG13	2.10	0.52
1:A:468:GLY:C	1:A:488:VAL:HG21	2.30	0.52
1:A:957:GLU:CG	1:A:958:PHE:H	2.21	0.52
1:A:306:LEU:HD12	1:A:311:VAL:HG22	1.92	0.52
1:A:526:THR:HG22	1:A:949:GLY:O	2.10	0.52
1:A:107:TYR:HE2	1:A:491:GLU:CG	2.06	0.51
1:A:208:GLY:O	1:A:211:ILE:HG22	2.10	0.51
1:A:209:PHE:HB3	1:A:334:ILE:HG21	1.91	0.51
1:A:529:TRP:CH2	1:A:938:ALA:HB1	2.45	0.51
1:A:466:PHE:HE1	1:A:487:LEU:H	1.59	0.51
1:A:907:THR:HB	1:A:943:GLY:CA	2.35	0.51
1:A:146:LEU:HD21	1:A:357:ASP:HB3	1.91	0.51
1:A:466:PHE:CD1	1:A:487:LEU:HA	2.45	0.51
1:A:416:ILE:HG23	1:A:416:ILE:O	2.10	0.51
1:A:36:ARG:NH1	1:A:810:GLU:O	2.44	0.51
1:A:846:LEU:O	1:A:848:ASN:N	2.44	0.51
1:A:677:ARG:O	1:A:678:ARG:HB2	2.11	0.51
1:A:227:ASN:HD22	1:A:291:ILE:HD12	1.76	0.51
1:A:507:GLU:CA	1:A:626:ILE:HG22	2.30	0.50
1:A:225:VAL:CG1	1:A:265:LEU:HD12	2.35	0.50
1:A:195:MET:HE3	1:A:360:VAL:HG12	1.92	0.50
1:A:871:LEU:HD13	1:A:948:ILE:HG13	1.93	0.50
1:A:520:MET:CE	1:A:541:THR:CB	2.89	0.50
1:A:106:ILE:HG23	1:A:489:ASN:H	1.75	0.50
1:A:298:ILE:HG22	1:A:300:PRO:HD2	1.94	0.50
1:A:238:VAL:HG23	1:A:359:MET:HE2	1.93	0.50
1:A:709:ILE:HG22	1:A:709:ILE:O	2.11	0.50
1:A:216:ALA:HA	1:A:308:PRO:HG3	1.94	0.50
1:A:202:LEU:O	1:A:206:VAL:HG23	2.12	0.50
1:A:547:ALA:C	1:A:548:HIS:HD1	2.15	0.49
1:A:285:ASP:O	1:A:286:ALA:C	2.50	0.49
1:A:2:ALA:HB3	1:A:6:LEU:HD22	1.93	0.49
1:A:501:TYR:CA	1:A:549:ARG:NH1	2.75	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:238:VAL:HG23	1:A:359:MET:CE	2.42	0.49
1:A:7:TYR:CD1	1:A:7:TYR:N	2.78	0.49
1:A:618:GLN:HE21	1:A:679:LEU:HG	1.76	0.49
1:A:486:PHE:O	1:A:487:LEU:HB3	2.13	0.49
1:A:487:LEU:CD1	1:A:488:VAL:N	2.54	0.49
1:A:6:LEU:HD12	1:A:7:TYR:H	1.78	0.49
1:A:623:VAL:HB	1:A:624:PRO:HD3	1.95	0.49
1:A:342:ARG:O	1:A:343:TYR:HD1	1.96	0.49
1:A:191:LEU:HD12	1:A:242:TYR:HB2	1.94	0.49
1:A:465:ILE:HG22	1:A:467:GLU:H	1.77	0.49
1:A:870:VAL:HG22	1:A:915:TRP:HH2	1.78	0.49
1:A:549:ARG:HG2	1:A:550:VAL:N	2.28	0.48
1:A:134:VAL:HB	1:A:280:VAL:HA	1.94	0.48
1:A:448:ILE:O	1:A:448:ILE:HG23	2.13	0.48
1:A:209:PHE:HB2	1:A:334:ILE:HG21	1.94	0.48
1:A:678:ARG:HH11	1:A:678:ARG:HG3	1.78	0.48
1:A:426:LEU:CD1	1:A:427:VAL:CG2	2.80	0.48
1:A:342:ARG:HD3	1:A:444:PRO:HG3	1.96	0.48
1:A:236:ALA:HB3	1:A:237:PRO:HD3	1.95	0.48
1:A:803:ASN:N	1:A:804:PRO:HD2	2.29	0.48
1:A:549:ARG:HG2	1:A:550:VAL:H	1.79	0.48
1:A:614:ARG:CZ	1:A:677:ARG:O	2.61	0.48
1:A:437:ILE:HG22	1:A:437:ILE:O	2.13	0.48
1:A:40:GLN:O	1:A:44:VAL:HG12	2.14	0.48
1:A:712:MET:HE2	1:A:781:VAL:HG22	1.71	0.48
1:A:210:LEU:HD21	1:A:337:SER:CB	2.43	0.48
1:A:548:HIS:O	1:A:549:ARG:HB3	2.14	0.47
1:A:960:VAL:HG12	1:A:960:VAL:O	2.13	0.47
1:A:747:VAL:HG11	1:A:853:SER:HB2	1.96	0.47
1:A:661:ALA:HB1	1:A:701:VAL:CG1	2.43	0.47
1:A:530:VAL:HG13	1:A:532:ALA:H	1.77	0.47
1:A:549:ARG:CB	1:A:686:ARG:CA	2.92	0.47
1:A:744:LEU:HD12	1:A:854:ASP:OD2	2.15	0.47
1:A:520:MET:H	1:A:521:PRO:CD	2.28	0.47
1:A:675:ALA:HB1	1:A:684:LEU:HD11	1.96	0.47
1:A:712:MET:CE	1:A:778:PHE:CZ	2.97	0.47
1:A:134:VAL:HG22	1:A:340:GLU:OE2	2.15	0.47
1:A:584:VAL:HG21	1:A:645:ILE:N	2.29	0.47
1:A:244:LEU:HD12	1:A:247:ARG:NH1	2.30	0.47
1:A:262:ALA:HB2	1:A:304:VAL:HG21	1.96	0.47
1:A:426:LEU:HD12	1:A:427:VAL:H	1.80	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:209:PHE:CE1	1:A:315:ILE:HG21	2.50	0.47
1:A:426:LEU:HD21	1:A:450:SER:HB2	1.96	0.47
1:A:579:LYS:HD2	1:A:641:VAL:HG21	1.96	0.47
1:A:871:LEU:HD23	1:A:871:LEU:C	2.36	0.47
1:A:382:ALA:O	1:A:386:VAL:HG23	2.14	0.46
1:A:426:LEU:HD23	1:A:452:MET:HB2	1.97	0.46
1:A:708:ARG:HD3	1:A:709:ILE:H	1.79	0.46
1:A:676:ARG:H	1:A:684:LEU:HD11	1.80	0.46
1:A:519:LYS:HZ1	1:A:679:LEU:HD21	1.79	0.46
1:A:477:VAL:O	1:A:478:CYS:CB	2.63	0.46
1:A:312:TYR:CE2	1:A:316:LEU:HD11	2.51	0.46
1:A:50:GLY:O	1:A:54:VAL:HG23	2.16	0.46
1:A:426:LEU:HD11	1:A:450:SER:HB3	1.98	0.46
1:A:94:ILE:HG21	1:A:496:ALA:CB	2.45	0.46
1:A:341:ASN:HA	1:A:341:ASN:HD22	1.61	0.46
1:A:334:ILE:CD1	1:A:375:LEU:HD21	2.45	0.46
1:A:744:LEU:HD21	1:A:850:ASN:HB2	1.98	0.46
1:A:492:LYS:CE	1:A:494:LEU:HD21	2.46	0.46
1:A:1:MET:HG2	1:A:1:MET:O	2.16	0.45
1:A:174:GLN:HA	1:A:177:VAL:HG22	1.97	0.45
1:A:596:PRO:HB2	1:A:597:PRO:HD3	1.98	0.45
1:A:6:LEU:HD12	1:A:7:TYR:N	2.31	0.45
1:A:486:PHE:CD1	1:A:487:LEU:N	2.85	0.45
1:A:229:ILE:HD12	1:A:291:ILE:O	2.16	0.45
1:A:588:PRO:O	1:A:592:VAL:HG23	2.16	0.45
1:A:665:PRO:O	1:A:669:THR:HG23	2.17	0.45
1:A:355:LEU:HD11	1:A:358:LEU:HG	1.99	0.45
1:A:92:LEU:HD22	1:A:386:VAL:CG2	2.47	0.45
1:A:877:LYS:O	1:A:878:LEU:HB2	2.17	0.45
1:A:885:GLY:O	1:A:886:ARG:HG3	2.16	0.45
1:A:335:ALA:HB1	1:A:384:GLY:HA3	1.98	0.45
1:A:349:LEU:O	1:A:349:LEU:HD22	2.16	0.44
1:A:807:PHE:CB	1:A:817:LEU:HD21	2.48	0.44
1:A:327:LEU:O	1:A:327:LEU:HD13	2.18	0.44
1:A:675:ALA:CB	1:A:684:LEU:HD11	2.48	0.44
1:A:549:ARG:CD	1:A:549:ARG:C	2.86	0.44
1:A:350:PRO:O	1:A:351:THR:HG23	2.18	0.44
1:A:609:PRO:O	1:A:613:THR:HG22	2.17	0.44
1:A:287:GLU:O	1:A:288:ASP:CB	2.66	0.44
1:A:103:LYS:C	1:A:493:LEU:CD1	2.50	0.44
1:A:778:PHE:CD2	1:A:780:VAL:CG2	2.93	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:867:LEU:HD12	1:A:868:ALA:H	1.81	0.44
1:A:125:VAL:HG13	1:A:445:GLN:HE21	1.82	0.44
1:A:549:ARG:CG	1:A:550:VAL:N	2.80	0.43
1:A:90:PRO:HG3	1:A:846:LEU:HD11	2.00	0.43
1:A:379:LEU:HD23	1:A:556:CYS:SG	2.57	0.43
1:A:875:ASN:C	1:A:876:LEU:HD22	2.39	0.43
1:A:830:VAL:O	1:A:831:ASN:ND2	2.42	0.43
1:A:545:ARG:HD3	1:A:545:ARG:HA	1.59	0.43
1:A:755:GLY:C	1:A:756:LEU:HD22	2.38	0.43
1:A:342:ARG:HG2	1:A:392:MET:SD	2.58	0.43
1:A:227:ASN:HB3	1:A:265:LEU:HD11	2.00	0.43
1:A:461:LEU:HD21	1:A:467:GLU:HB2	2.00	0.43
1:A:583:ARG:O	1:A:584:VAL:CG2	2.65	0.43
1:A:399:ILE:HD13	1:A:399:ILE:O	2.18	0.43
1:A:907:THR:HG22	1:A:943:GLY:C	2.38	0.43
1:A:737:VAL:HG21	1:A:845:TRP:NE1	2.34	0.43
1:A:957:GLU:HG2	1:A:958:PHE:HB2	2.00	0.43
1:A:146:LEU:HD22	1:A:199:GLN:HB2	2.00	0.43
1:A:202:LEU:HB2	1:A:351:THR:HG21	2.00	0.43
1:A:212:LEU:C	1:A:212:LEU:HD13	2.39	0.43
1:A:355:LEU:HD12	1:A:357:ASP:OD1	2.19	0.43
1:A:633:GLU:HG3	1:A:668:GLN:HB3	2.01	0.43
1:A:847:GLU:O	1:A:849:ASN:N	2.52	0.43
1:A:270:GLU:CG	1:A:284:ALA:HB2	2.47	0.43
1:A:5:VAL:HG11	1:A:17:PRO:HB3	1.99	0.43
1:A:103:LYS:C	1:A:493:LEU:HD21	2.39	0.43
1:A:461:LEU:HD23	1:A:461:LEU:O	2.19	0.42
1:A:396:LYS:HA	1:A:399:ILE:HG22	2.01	0.42
1:A:812:SER:O	1:A:817:LEU:HD23	2.19	0.42
1:A:897:PRO:N	1:A:898:PRO:HD2	2.34	0.42
1:A:529:TRP:CH2	1:A:938:ALA:CB	2.89	0.42
1:A:125:VAL:CG1	1:A:445:GLN:HE21	2.31	0.42
1:A:487:LEU:CG	1:A:488:VAL:N	2.80	0.42
1:A:299:GLN:HB3	1:A:300:PRO:HD3	2.01	0.42
1:A:615:GLU:OE2	1:A:678:ARG:NH2	2.46	0.42
1:A:676:ARG:N	1:A:684:LEU:HD11	2.34	0.42
1:A:202:LEU:HD12	1:A:349:LEU:HD23	2.01	0.42
1:A:684:LEU:HA	1:A:684:LEU:HD12	1.93	0.42
1:A:529:TRP:CZ3	1:A:942:GLY:HA2	2.54	0.42
1:A:152:LEU:HD11	1:A:170:THR:CG2	2.50	0.42
1:A:679:LEU:HD22	1:A:681:ARG:O	2.19	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:264:LEU:HA	1:A:267:MET:HE2	2.01	0.42
1:A:740:ARG:CD	1:A:795:ILE:HG21	2.49	0.42
1:A:306:LEU:HD23	1:A:306:LEU:N	2.35	0.42
1:A:671:ILE:O	1:A:671:ILE:HD13	2.20	0.42
1:A:678:ARG:NH1	1:A:678:ARG:HG3	2.35	0.41
1:A:826:GLY:N	1:A:848:ASN:HD22	2.17	0.41
1:A:667:GLN:O	1:A:670:VAL:HG12	2.20	0.41
1:A:250:VAL:O	1:A:291:ILE:HG23	2.19	0.41
1:A:592:VAL:HG13	1:A:596:PRO:HG2	2.02	0.41
1:A:106:ILE:CG2	1:A:489:ASN:H	2.33	0.41
1:A:608:SER:O	1:A:612:LEU:HD13	2.20	0.41
1:A:250:VAL:HG13	1:A:318:TYR:HE1	1.85	0.41
1:A:526:THR:O	1:A:526:THR:HG23	2.20	0.41
1:A:445:GLN:HB3	1:A:475:ALA:O	2.20	0.41
1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:O	2.21	0.41
1:A:583:ARG:O	1:A:584:VAL:CB	2.69	0.41
1:A:828:ALA:HB3	1:A:829:PRO:CD	2.36	0.41
1:A:671:ILE:CD1	1:A:671:ILE:C	2.86	0.41
1:A:95:ILE:O	1:A:385:ARG:NH2	2.50	0.41
1:A:871:LEU:HB3	1:A:948:ILE:HD12	2.01	0.41
1:A:139:TYR:CE2	1:A:350:PRO:HB3	2.55	0.41
1:A:191:LEU:HD23	1:A:191:LEU:C	2.41	0.41
1:A:221:VAL:HG13	1:A:221:VAL:O	2.21	0.41
1:A:736:GLY:N	1:A:788:ASN:OD1	2.54	0.41
1:A:550:VAL:CG1	1:A:753:VAL:CA	2.97	0.41
1:A:675:ALA:CB	1:A:684:LEU:HG	2.39	0.41
1:A:893:LEU:HD22	1:A:893:LEU:O	2.20	0.41
1:A:548:HIS:CE1	1:A:685:GLU:HB3	2.56	0.41
1:A:719:GLN:CG	1:A:726:ILE:HD12	2.51	0.41
1:A:445:GLN:CB	1:A:475:ALA:O	2.69	0.41
1:A:791:HIS:O	1:A:795:ILE:HD12	2.21	0.41
1:A:717:ASP:N	1:A:718:PRO:CD	2.83	0.41
1:A:683:THR:OG1	1:A:738:ARG:NH1	2.54	0.41
1:A:960:VAL:CG1	1:A:962:LYS:HD2	2.51	0.40
1:A:598:ARG:O	1:A:599:ARG:HB3	2.20	0.40
1:A:807:PHE:CG	1:A:817:LEU:HD21	2.57	0.40
1:A:719:GLN:NE2	1:A:726:ILE:HG21	2.37	0.40
1:A:94:ILE:HD12	1:A:496:ALA:O	2.20	0.40
1:A:667:GLN:O	1:A:670:VAL:CG1	2.70	0.40

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles

5.3.1 Protein backbone

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 EM 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	961/982 (98%)	781 (81%)	150 (16%)	30 (3%)	5	44

All (30) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	276	PHE
1	A	288	ASP
1	A	481	ASN
1	A	519	LYS
1	A	520	MET
1	A	847	GLU
1	A	848	ASN
1	A	892	SER
1	A	286	ALA
1	A	353	VAL
1	A	584	VAL
1	A	709	ILE
1	A	831	ASN
1	A	272	PRO
1	A	457	TYR
1	A	549	ARG
1	A	675	ALA
1	A	750	THR
1	A	839	SER
1	A	161	PRO
1	A	274	PRO
1	A	300	PRO
1	A	761	SER
1	A	871	LEU
1	A	244	LEU
1	A	957	GLU
1	A	624	PRO
1	A	350	PRO

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	640	PRO
1	A	592	VAL

5.3.2 Protein sidechains ⓘ

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 EM 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	806/821 (98%)	718 (89%)	88 (11%)	8 39

All (88) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	7	TYR
1	A	40	GLN
1	A	43	ARG
1	A	55	TRP
1	A	116	PHE
1	A	121	MET
1	A	130	ASP
1	A	131	LYS
1	A	185	MET
1	A	219	LYS
1	A	254	LYS
1	A	265	LEU
1	A	269	ARG
1	A	306	LEU
1	A	327	LEU
1	A	332	GLN
1	A	341	ASN
1	A	342	ARG
1	A	344	PHE
1	A	349	LEU
1	A	363	PHE
1	A	399	ILE
1	A	407	ARG
1	A	425	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	426	LEU
1	A	434	LEU
1	A	446	MET
1	A	478	CYS
1	A	479	THR
1	A	487	LEU
1	A	491	GLU
1	A	492	LYS
1	A	493	LEU
1	A	494	LEU
1	A	497	ASP
1	A	518	HIS
1	A	519	LYS
1	A	520	MET
1	A	549	ARG
1	A	572	ARG
1	A	582	ARG
1	A	599	ARG
1	A	601	SER
1	A	603	THR
1	A	612	LEU
1	A	614	ARG
1	A	619	LEU
1	A	656	MET
1	A	658	LEU
1	A	666	MET
1	A	671	ILE
1	A	673	THR
1	A	676	ARG
1	A	677	ARG
1	A	679	LEU
1	A	685	GLU
1	A	716	ARG
1	A	754	LYS
1	A	756	LEU
1	A	767	ARG
1	A	769	LEU
1	A	778	PHE
1	A	783	THR
1	A	800	ARG
1	A	810	GLU
1	A	824	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	831	ASN
1	A	839	SER
1	A	840	PRO
1	A	842	TRP
1	A	843	LYS
1	A	854	ASP
1	A	867	LEU
1	A	875	ASN
1	A	884	LEU
1	A	886	ARG
1	A	887	LEU
1	A	889	GLU
1	A	893	LEU
1	A	905	PHE
1	A	909	SER
1	A	933	ARG
1	A	934	TRP
1	A	941	CYS
1	A	958	PHE
1	A	968	LEU
1	A	969	ARG
1	A	974	LEU

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (20) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	40	GLN
1	A	105	GLN
1	A	174	GLN
1	A	230	HIS
1	A	279	HIS
1	A	299	GLN
1	A	329	GLN
1	A	341	ASN
1	A	387	HIS
1	A	388	GLN
1	A	405	GLN
1	A	429	GLN
1	A	489	ASN
1	A	618	GLN
1	A	695	GLN
1	A	719	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	791	HIS
1	A	797	GLN
1	A	849	ASN
1	A	875	ASN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

5.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains [i](#)

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.