



wwPDB/EMDataBank EM Map/Model Validation Summary Report ⓘ

Jan 17, 2017 – 04:29 PM EST

PDB ID : 5WUA
EMDB ID: : EMD-6689
Title : Structure of a Pancreatic ATP-sensitive Potassium Channel
Authors : Li, N.; Wu, J.-X.; Chen, L.; Gao, N.
Deposited on : 2016-12-16
Resolution : 5.60 Å(reported)

This is a wwPDB/EMDataBank EM Map/Model Validation Summary Report
for a publicly released PDB/EMDB entry.

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org
A user guide is available at
<http://wwpdb.org/validation/2016/EMValidationReportHelp>
with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

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) : rb-20028442

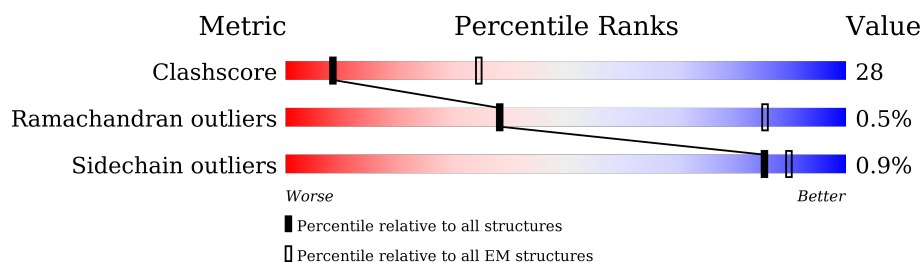
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

ELECTRON MICROSCOPY

The reported resolution of this entry is 5.60 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	681	
1	B	681	
1	C	681	
1	D	681	
2	E	1582	
2	F	1582	
2	G	1582	
2	H	1582	

2 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 36912 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 ATP-sensitive inward rectifier potassium channel 11,superfolder GFP.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
1	A	323	Total	C	N	O	S	0	0
			2383	1540	410	419	14		
1	B	323	Total	C	N	O	S	0	0
			2383	1540	410	419	14		
1	C	323	Total	C	N	O	S	0	0
			2383	1540	410	419	14		
1	D	323	Total	C	N	O	S	0	0
			2383	1540	410	419	14		

- Molecule 2 is a protein called SUR1.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
2	E	1312	Total	C	N	O	S	0	0
			6845	4133	1357	1352	3		
2	F	1312	Total	C	N	O	S	0	0
			6845	4133	1357	1352	3		
2	G	1312	Total	C	N	O	S	0	0
			6845	4133	1357	1352	3		
2	H	1312	Total	C	N	O	S	0	0
			6845	4133	1357	1352	3		

SER	VAL	PRO	ASN	LYS	SER
GLY	ARG	GLU	VAL	ASP	GLY
TRP	GLY	GLY	TYR	PRO	TRP
SER	VAL	TYR	ILE	ASN	SER
HIS	GLY	VAL	THR	ALA	HIS
PRO	GLU	GLN	ALA	LYS	PRO
GLN	GLY	GLU	ASP	ARG	GLN
PHE	ASP	ARG	LYS	ASP	PHE
GLU	ALA	THR	GLN	HIS	GLU
LYS	THR	ILE	LYS	MET	LYS
	THR	ILE	ASN	VAL	
	ILE	PHE	GLY	LEU	
SER	GLY	PHE	ILE	HIS	SER
ILE	LYS	LYS	ILE	LYS	ILE
SER	LEU	ASP	LYS	TYR	SER
PRO	THR	ASP	ALA	TYR	PRO
ASN	LEU	ASN	VAL	ALA	ASN
GLY	THR	ARG	GLY	THR	GLY
VAL	THR	ALA	VAL	HIS	VAL
GLN	GLY	VAL	GLU	HIS	GLN
LEU	LYS	LYS	ASP	HIS	LEU
GLU	LEU	PHE	GLY	HIS	GLU
THR	THR	ASN	ILE	GLY	THR
PRO	PRO	THR	ASN	THR	PRO
GLY	PRO	THR	VAL	ASP	GLY
LYS	THR	ILE	GLN	VAL	LYS
GLY	LEU	GLU	GLN	PRO	GLY
THR	THR	LEU	ASN	ARG	THR
THR	TYR	LYS	THR	GLY	THR
PHE	VAL	THR	ILE	GLY	PHE
ASP	THR	ASP	GLY	ASP	ASP
GLY	CYS	PHE	ASP	SER	GLY
VAL	PHE	LYS	GLY	HIS	VAL
PRO	ARG	ASP	VAL	PRO	PRO
ILE	TYR	GLY	LEU	PHE	ILE
LEU	PRO	ASN	LEU	GLU	LEU
VAL	ASP	ILE	PRO	LYS	VAL
GLU	HIS	LEU	ASP	GLY	GLU
LEU	MET	GLY	ASN	SER	LEU
ASP	LYS	HIS	HIS	GLY	ASP
GLY	ARG	LYS	TYR	ASP	GLY
ASP	HIS	LEU	LEU	TYR	ASP
VAL	ASP	SER	THR	LYS	VAL
ASN	PHE	GLN	THR	ASP	ASN
GLY	THR	ASN	GLN	ASP	GLY
HIS	LYS	LYS	THR	ASP	HIS
LYS	SER	ASN	LYS	ASP	LYS
ALA	MET	HIS	LEU	GLY	ALA
PHE	THR	THR	SER	THR	PHE

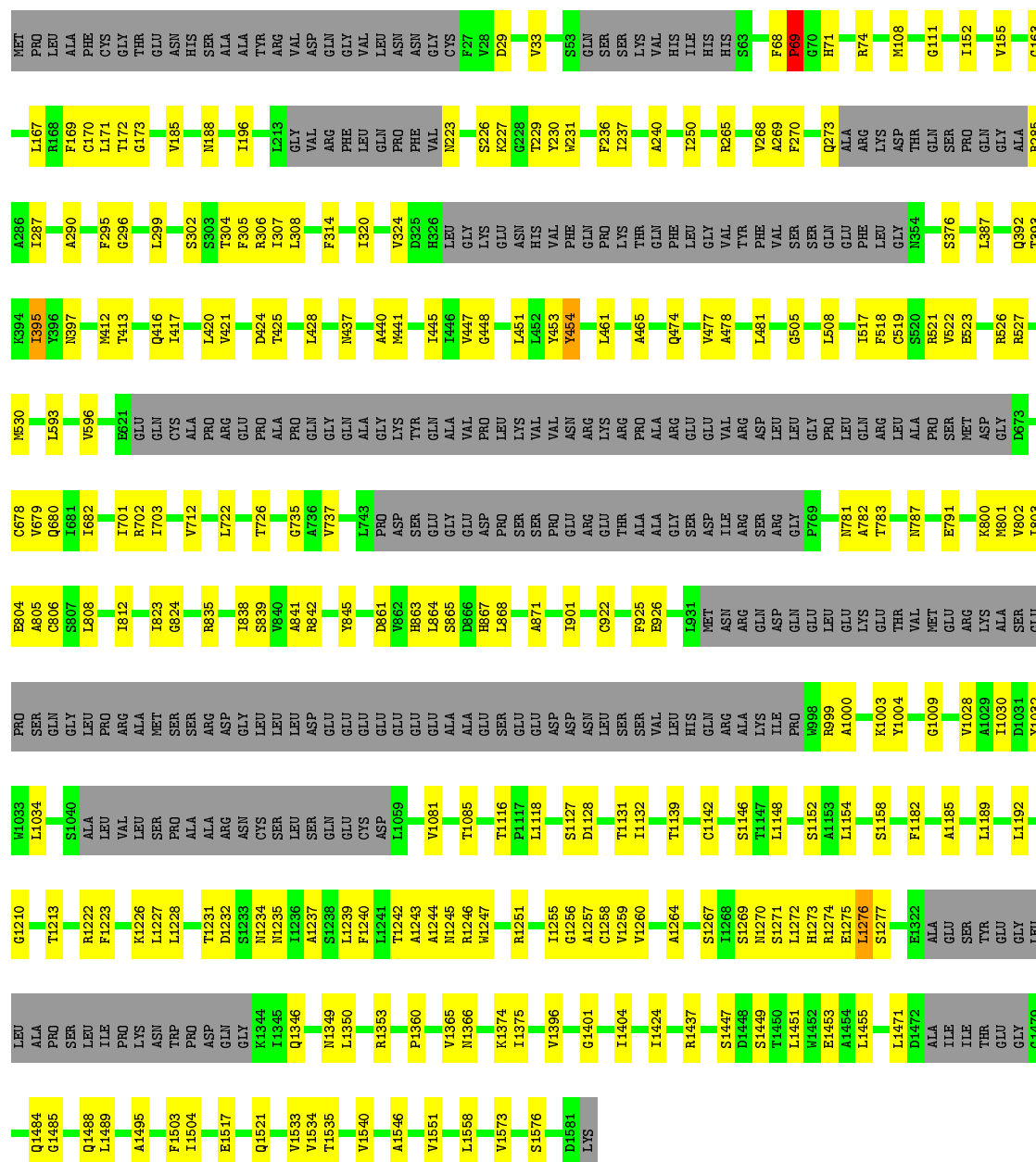
- Molecule 1: ATP-sensitive inward rectifier potassium channel 11,superfolder GFP

Chain D: 23% 24% 53%

SEN	ASN	ILE	TTR	GLU	VAL	A300	S225	E140	D65
HIS PRO GLN PHE GLU GLU LYS	GLU	THR	VAL	GLY	ALA	R301	S226	E141	L66
	GLN	LYS	GLY	LYS	ALA	T302	E227	C142	K67
	ASP	ASP	GLU	GLY	ALA	S303	G228	P143	W68
	HIS	LYS	ARG	ASP	LYS	Y304	E229	L144	P69
	GLU	GLN	THR	ALA	PRO	L305		A145	H70
	MET	LYS	ILE	THR	LYS	A306	P232	I146	T71
	VAL	ASN	SER	ILE	PHE		L233	L147	
	LEU	HIS	PHE	GLY	SER	L310	H234	I148	I74
	GLU	GLY	LYS	LYS	LEU	W311	E241	L149	F75
	LYS	ASP	ALA	ASP	THR	G312	I242	I150	T76
VAL	VAL	ASN	GLY	LEU	ASP	Q313	G243	F79	
ASN	ASN	PHE	LYS	LYS	SER	R314	G248	W83	
ALA	ALA	VAL	TTR	PHE	LEU	F315	I249	L84	
GLY	GLY	VAL	LYS	ILE	SER		F250	M158	L85
ILE	ILE	ARG	THR	CYS	LEU	V319	L251	M158	F86
THR	THR	ASN	ALA	THR	GLU	A320		M163	
VAL	HIS	VAL	VAL	GLY	GLU	S327	P284	L164	M88
GLY	GLY	GLU	VAL	LYS	VAL	L285	L286	G165	W89
VAL	HIS	ASP	LYS	LEU	LEU	D329	I286	W90	ALA
ASP	HIS	GLY	PHE	PRO	PHE	Y330	I257	F168	W91
GLY	HIS	SER	GLY	VAL	GLN	S331	Y258	M169	L92
HIS	HIS	VAL	GLY	PRO	GLY	K332	H289	K170	
GLN	HIS	GLN	THR	TRP	PRO	G333	W280	T171	A94
LEU	HIS	LEU	THR	PRO	GLY	G334	I281	H175	A96
GLY	ASP	GLA	THR	LEU	LYS	N335	D282	R176	H97
ASP	SER	ASP	VAL	LEU	GLY	T336	S263		
ASN	GLY	HIS	ASN	VAL	MET		I284		
THR	THR	TTR	ARG	SER	SER	T341	S285		L100
THR	VAL	GLN	THR	THR	LYS	P342		L181	
GLN	VAL	GLN	ILE	LEU	GLY	T345	Y288	I182	C110
ASN	ASN	ASN	LEU	THR	GLU		D269	F183	F35
THR	GLY	THR	LYS	TTR	GLU	L270	L270	S184	V36
PRO	GLY	PRO	GLY	GLY	LEU		A271	K185	S37
GLY	SER	ILE	THR	VAL	PHE	Q348	P272		
TRP	GLY	GLY	THR	VAL	THR	L349		V188	
ASP	ASP	GLY	PHE	CYS	GLY	R350	L275	I189	G40
HIS	HIS	LYS	LYS	PHE	VAL	D352	E351	T190	M41
PRO	PRO	PRO	GLU	SER	VAL		H276	L191	
GLN	GLN	VAL	ASP	ARG	PRO	L356	Q279	R192	V44
PHE	PHE	LEU	GLY	THR	ILE	ASP	D280	H193	A45
LEU	GLU	LEU	ASN	PRO	LEU	ALA	L281		F121
PRO	LYS	PRO	LEU	VAL	VAL	LEU	E282		K47
GLY	GLY	ILE	LYS	VAL	GLY	THR	I283	F198	M48
SER	SER	ASN	GLY	HIS	GLU	LEU		M199	I49
GLY	GLY	ASN	GLY	MET	LEU	LEU	L286	L200	R50
LYS	LYS	HIS	HIS	LYS	ASP	ALA		R201	E51
ASP	ASP	TTR	LYS	GLY	GLY	SER	L287	V202	E126
THR	THR	TTR	LYS	HIS	ASP	SER	G288	Q203	V127
GLU	GLU	LEU	LEU	HIS	VAL	ARG	E289	D204	V129
ASN	ASN	THR	TTR	PHE	GLY	GLY	V290	L205	T130
ASP	ASP	GLN	ASN	PHE	GLY	PRO	W291	R206	L56
ASP	ASP	THR	PHE	LYS	HIS	LEU		E287	G132
ASP	ASP	LYS	ASN	SER	LYS	ARG	T294	S208	F133
GLY	GLY	LEU	SER	ALA	PHE	LYS	G295		G134
LYS	LYS	THR	THR	PHE	THR	ASN	I296		
GLY	GLY	THR	THR	MET	VAL	SER	T297		
LYS	LYS	ASN	ASN	PRO	VAL	GLY	T298		
GLY	GLY	PRO	VAL	GLY	ARG	VAL	T299		
THR	THR	THR	TTR	GLY	GLY	ALA			
				</					

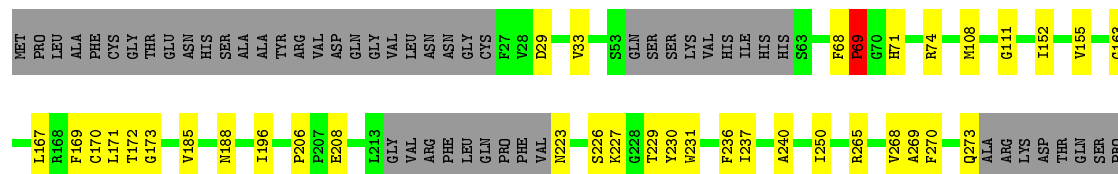
- Molecule 2: SUR1

Chain E:  68% 15% 17%



- Molecule 2: SUR1

Chain F:  67% 15% 17%



D1472	ALA	ILE	THR	GLY	GLU	GLY	Q1479	Q1484	G1485	Q1488	L1489	A1495	F1503	I1504	E1517	Q1521	R1531	T1532	V1533	V1534	T1535	V1540	A1546	V1551	L1558	V1573	S1576	D1581	LYS																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																		
-------	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-----	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--

• Molecule 2: SUR1

Chain G:  67% 16% 17%

MET		PRO		LEU		ALA		PHE		CYS		GLY		THR		GLU		ASN		HIS		SER		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA		ALA	
-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--	-----	--






4 Experimental information ⓘ

Property	Value	Source
Reconstruction method	SINGLE PARTICLE	Depositor
Imposed symmetry	POINT, Not provided	Depositor
Number of particles used	34500	Depositor
Resolution determination method	FSC 0.143 CUT-OFF	Depositor
CTF correction method	Not provided	Depositor
Microscope	FEI TITAN KRIOS	Depositor
Voltage (kV)	300	Depositor
Electron dose ($e^-/\text{\AA}^2$)	Not provided	Depositor
Minimum defocus (nm)	Not provided	Depositor
Maximum defocus (nm)	Not provided	Depositor
Magnification	Not provided	Depositor
Image detector	Not provided	Depositor

5 Model quality

5.1 Standard geometry

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	0.46	0/2437	0.67	2/3330 (0.1%)
1	B	0.46	0/2437	0.67	2/3330 (0.1%)
1	C	0.46	0/2437	0.67	2/3330 (0.1%)
1	D	0.46	0/2437	0.67	2/3330 (0.1%)
2	E	0.29	0/6859	0.48	1/9515 (0.0%)
2	F	0.29	0/6859	0.48	1/9515 (0.0%)
2	G	0.29	0/6859	0.48	1/9515 (0.0%)
2	H	0.29	0/6859	0.49	1/9515 (0.0%)
All	All	0.35	0/37184	0.54	12/51380 (0.0%)

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 outliers	#Planarity outliers
1	A	0	3
1	B	0	3
1	C	0	3
1	D	0	3
2	E	0	2
2	F	0	2
2	G	0	2
2	H	0	2
All	All	0	20

There are no bond length outliers.

The worst 5 of 12 bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	H	1276	LEU	CA-CB-CG	6.92	131.22	115.30
2	F	1276	LEU	CA-CB-CG	6.92	131.22	115.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	G	1276	LEU	CA-CB-CG	6.92	131.21	115.30
2	E	1276	LEU	CA-CB-CG	6.91	131.19	115.30
1	C	270	LEU	C-N-CA	6.62	138.25	121.70

There are no chirality outliers.

5 of 20 planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	251	LEU	Peptide
1	A	257	ILE	Peptide
1	A	260	VAL	Peptide
1	B	251	LEU	Peptide
1	B	257	ILE	Peptide

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	2383	0	2295	392	0
1	B	2383	0	2295	392	0
1	C	2383	0	2295	378	0
1	D	2383	0	2295	384	0
2	E	6845	0	3587	157	0
2	F	6845	0	3587	157	0
2	G	6845	0	3587	158	0
2	H	6845	0	3587	162	0
All	All	36912	0	23528	1698	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 28.

The worst 5 of 1698 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:146:ILE:CD1	1:B:122:LEU:HD21	1.18	1.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:146:ILE:CG1	1:B:122:LEU:HD21	1.22	1.64
1:A:154:ILE:CD1	1:B:76:THR:HG23	1.25	1.61
1:A:229:GLU:HG3	1:B:314:ARG:CZ	1.20	1.59
1:A:122:LEU:CD2	1:D:146:ILE:CD1	1.75	1.59

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles [i](#)

5.3.1 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 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	319/681 (47%)	286 (90%)	33 (10%)	0	100	100
1	B	319/681 (47%)	285 (89%)	34 (11%)	0	100	100
1	C	319/681 (47%)	285 (89%)	34 (11%)	0	100	100
1	D	319/681 (47%)	286 (90%)	33 (10%)	0	100	100
2	E	1290/1582 (82%)	1116 (86%)	166 (13%)	8 (1%)	30	74
2	F	1290/1582 (82%)	1116 (86%)	167 (13%)	7 (0%)	34	77
2	G	1290/1582 (82%)	1115 (86%)	167 (13%)	8 (1%)	30	74
2	H	1290/1582 (82%)	1116 (86%)	167 (13%)	7 (0%)	34	77
All	All	6436/9052 (71%)	5605 (87%)	801 (12%)	30 (0%)	38	77

5 of 30 Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
2	E	196	ILE
2	E	454	TYR
2	E	1540	VAL
2	F	196	ILE
2	F	1540	VAL

5.3.2 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 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	240/591 (41%)	239 (100%)	1 (0%)	93	96
1	B	240/591 (41%)	239 (100%)	1 (0%)	93	96
1	C	240/591 (41%)	239 (100%)	1 (0%)	93	96
1	D	240/591 (41%)	239 (100%)	1 (0%)	93	96
2	E	93/1371 (7%)	91 (98%)	2 (2%)	60	83
2	F	93/1371 (7%)	91 (98%)	2 (2%)	60	83
2	G	93/1371 (7%)	91 (98%)	2 (2%)	60	83
2	H	93/1371 (7%)	91 (98%)	2 (2%)	60	83
All	All	1332/7848 (17%)	1320 (99%)	12 (1%)	85	93

5 of 12 residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
2	E	231	TRP
2	F	226	SER
2	G	231	TRP
2	E	226	SER
2	G	226	SER

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. 5 of 31 such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	C	46	HIS
1	C	193	HIS
2	E	234	ASN
1	C	153	ASN
1	C	216	HIS

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.