



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Feb 26, 2014 – 09:37 PM GMT

PDB ID : 4F7B
Title : Structure of the lysosomal domain of limp-2
Authors : Neculai, D.; Ravichandran, M.; Seitova, A.; Neculai, M.; Pizzaro, J.C.; Bountra, C.; Edwards, A.M.; Arrowsmith, C.H.; Dhe-Paganon, D.; Structural Genomics Consortium (SGC)
Deposited on : 2012-05-15
Resolution : 3.00 Å(reported)

This is a full wwPDB validation report for a publicly released PDB entry.
We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org
A user guide is available at <http://wwpdb.org/ValidationPDFNotes.html>

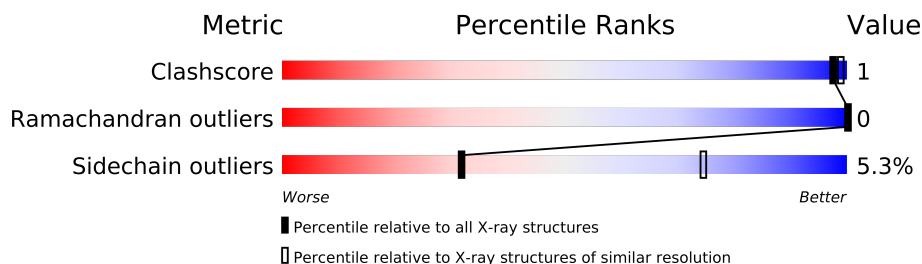
The following versions of software and data (see [references](#)) were used in the production of this report:

MolProbity : 4.02b-467
Mogul : 1.15 2013
Xtriage (Phenix) : dev-1323
EDS : **FAILED**
Percentile statistics : 21963
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et. al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : stable22683

1 Overall quality at a glance

The reported resolution of this entry is 3.00 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)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
Clashscore	79885	1594 (3.00-3.00)
Ramachandran outliers	78287	1537 (3.00-3.00)
Sidechain outliers	78261	1540 (3.00-3.00)

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the electron density. The red, orange, yellow and green segments on the lower bar indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. The upper red bar (where present) indicates the fraction of residues that have poor fit to the electron density.

Note EDS failed to run properly.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	423	
1	B	423	
1	C	423	
1	D	423	
1	E	423	
1	F	423	

2 Entry composition

There are 10 unique types of molecules in this entry. The entry contains 19810 atoms, of which 0 are hydrogen and 0 are deuterium.

In the tables below, the ZeroOcc column contains the number of atoms modelled with zero occupancy, 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 Lysosome membrane protein 2.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	393	Total	C	N	O	S	0	0	0
			3093	1995	503	584	11			
1	B	393	Total	C	N	O	S	0	0	0
			3073	1981	493	588	11			
1	C	378	Total	C	N	O	S	0	0	0
			2969	1919	475	564	11			
1	D	389	Total	C	N	O	S	0	0	0
			3090	1989	501	589	11			
1	E	390	Total	C	N	O	S	0	0	0
			3100	1999	503	587	11			
1	F	390	Total	C	N	O	S	0	0	0
			3100	1997	501	591	11			

There are 162 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
C	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
D	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
F	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108

- Molecule 2 is a polymer of unknown type called SUGAR (4-MER).

Mol	Chain	Residues	Atoms				ZeroOcc	AltConf
2	A	4	Total	C	N	O	0	0
			50	28	2	20		
2	E	4	Total	C	N	O	0	0
			50	28	2	20		
2	F	4	Total	C	N	O	0	0
			50	28	2	20		
2	E	4	Total	C	N	O	0	0
			50	28	2	20		

There are 108 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
E	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
E	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108

- Molecule 3 is a polymer of unknown type called SUGAR (5-MER).

Mol	Chain	Residues	Atoms				ZeroOcc	AltConf
3	A	5	Total	C	N	O	0	0
			64	36	3	25		
3	D	5	Total	C	N	O	0	0
			64	36	3	25		

There are 54 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108

- Molecule 4 is a polymer of unknown type called SUGAR (3-MER).

Mol	Chain	Residues	Atoms				ZeroOcc	AltConf
4	A	3	Total	C	N	O	0	0
			39	22	2	15		
4	A	3	Total	C	N	O	0	0
			39	22	2	15		
4	B	3	Total	C	N	O	0	0
			39	22	2	15		
4	C	3	Total	C	N	O	0	0
			39	22	2	15		
4	D	3	Total	C	N	O	0	0
			39	22	2	15		
4	E	3	Total	C	N	O	0	0
			39	22	2	15		
4	F	3	Total	C	N	O	0	0
			39	22	2	15		
4	F	3	Total	C	N	O	0	0
			39	22	2	15		

There are 216 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
B	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
D	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
E	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
F	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108

- Molecule 5 is a polymer of unknown type called SUGAR (2-MER).

Mol	Chain	Residues	Atoms				ZeroOcc	AltConf
5	A	2	Total	C	N	O	0	0
			28	16	2	10		
5	B	2	Total	C	N	O	0	0
			28	16	2	10		
5	C	2	Total	C	N	O	0	0
			28	16	2	10		
5	D	2	Total	C	N	O	0	0
			28	16	2	10		
5	C	2	Total	C	N	O	0	0
			28	16	2	10		
5	C	2	Total	C	N	O	0	0
			28	16	2	10		
5	D	2	Total	C	N	O	0	0
			28	16	2	10		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms				ZeroOcc	AltConf
5	D	2	Total	C	N	O	0	0
			28	16	2	10		
5	E	2	Total	C	N	O	0	0
			28	16	2	10		
5	F	2	Total	C	N	O	0	0
			28	16	2	10		

There are 270 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
A	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
B	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
C	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
C	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
C	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
C	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108

Continued on next page...

Continued from previous page...

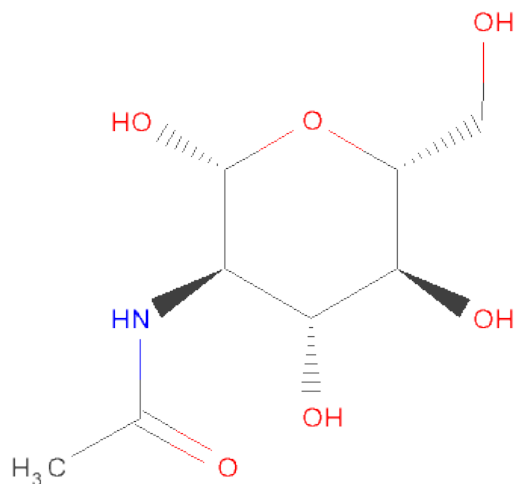
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
D	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
D	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
E	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108

- Molecule 6 is SUGAR (N-ACETYL-D-GLUCOSAMINE) (three-letter code: NAG) (formula: $C_8H_{15}NO_6$).



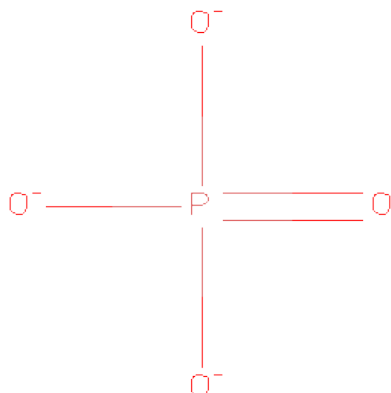
Mol	Chain	Residues	Atoms				ZeroOcc	AltConf
6	A	1	Total	C	N	O	0	0
			14	8	1	5		
6	A	1	Total	C	N	O	0	0
			14	8	1	5		
6	A	1	Total	C	N	O	0	0
			14	8	1	5		
6	B	1	Total	C	N	O	0	0
			14	8	1	5		
6	B	1	Total	C	N	O	0	0
			14	8	1	5		
6	B	1	Total	C	N	O	0	0
			14	8	1	5		
6	B	1	Total	C	N	O	0	0
			14	8	1	5		
6	C	1	Total	C	N	O	0	0
			14	8	1	5		
6	C	1	Total	C	N	O	0	0
			14	8	1	5		
6	D	1	Total	C	N	O	0	0
			14	8	1	5		
6	E	1	Total	C	N	O	0	0
			14	8	1	5		
6	F	1	Total	C	N	O	0	0
			14	8	1	5		
6	F	1	Total	C	N	O	0	0
			14	8	1	5		
6	F	1	Total	C	N	O	0	0
			14	8	1	5		

Continued on next page...

Continued from previous page...

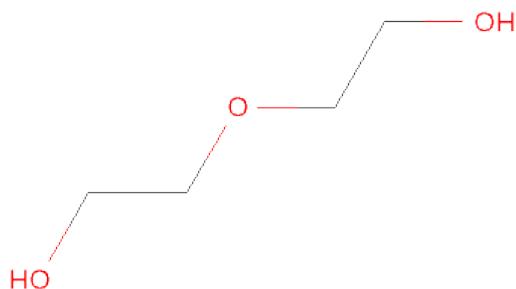
Mol	Chain	Residues	Atoms				ZeroOcc	AltConf
6	F	1	Total	C	N	O	0	0
			14	8	1	5		

- Molecule 7 is PHOSPHATE ION (three-letter code: PO4) (formula: O₄P).



Mol	Chain	Residues	Atoms			ZeroOcc	AltConf
7	A	1	Total	O	P	0	0
			5	4	1		
7	B	1	Total	O	P	0	0
			5	4	1		
7	C	1	Total	O	P	0	0
			5	4	1		
7	D	1	Total	O	P	0	0
			5	4	1		
7	E	1	Total	O	P	0	0
			5	4	1		
7	F	1	Total	O	P	0	0
			5	4	1		

- Molecule 8 is DI(HYDROXYETHYL)ETHER (three-letter code: PEG) (formula: C₄H₁₀O₃).



Mol	Chain	Residues	Atoms			ZeroOcc	AltConf
8	A	1	Total	C	O	0	0
			7	4	3		
8	F	1	Total	C	O	0	0
			7	4	3		

- Molecule 9 is a polymer of unknown type called SUGAR (6-MER).

Mol	Chain	Residues	Atoms				ZeroOcc	AltConf
9	B	6	Total	C	N	O	0	0
			75	42	3	30		
9	E	6	Total	C	N	O	0	0
			75	42	3	30		

There are 54 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
B	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
B	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
B	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
E	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
E	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108

- Molecule 10 is a polymer of unknown type called SUGAR (5-MER).

Mol	Chain	Residues	Atoms				ZeroOcc	AltConf
10	F	5	Total	C	N	O	0	0
			61	34	2	25		

There are 27 discrepancies between the modelled and reference sequences:

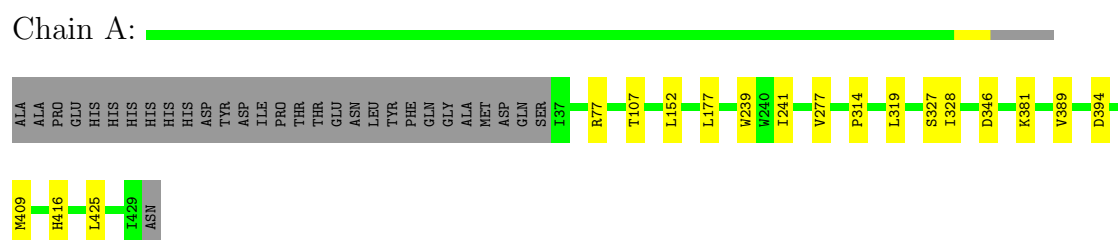
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
F	8	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	9	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	10	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	11	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	12	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	13	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	14	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	15	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	16	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	17	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	18	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	19	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	20	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	21	ILE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	22	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	23	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	24	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	25	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	26	ASN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	27	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	28	TYR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	29	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	30	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	31	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	32	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	33	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108
F	34	ASP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q14108

3 Residue-property plots

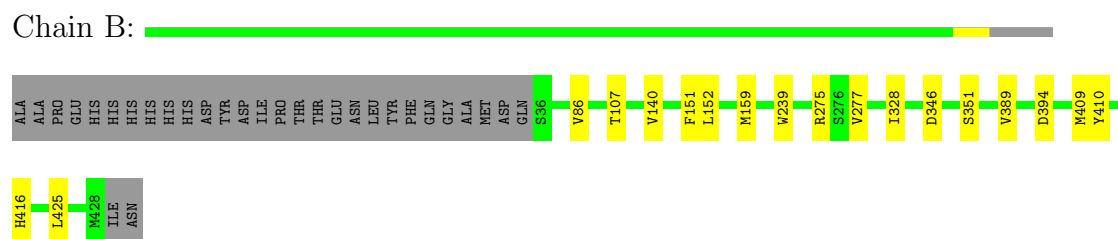
These plots are drawn for all protein, RNA and DNA chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of errors displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry and electron density. Residues are color-coded according 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. A red dot above a residue indicates a poor fit to the electron density ($RSRZ > 2$). 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.

Note EDS failed to run properly.

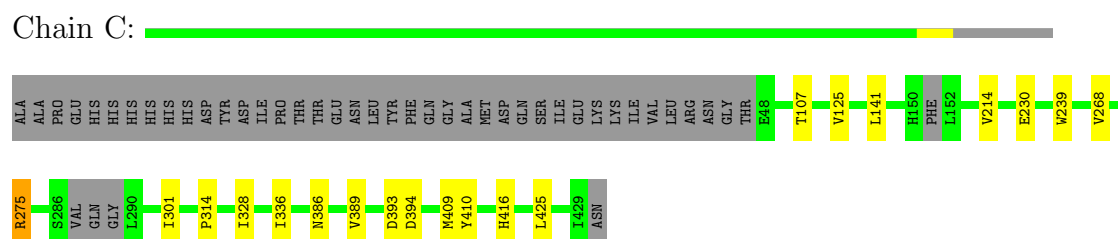
- Molecule 1: Lysosome membrane protein 2



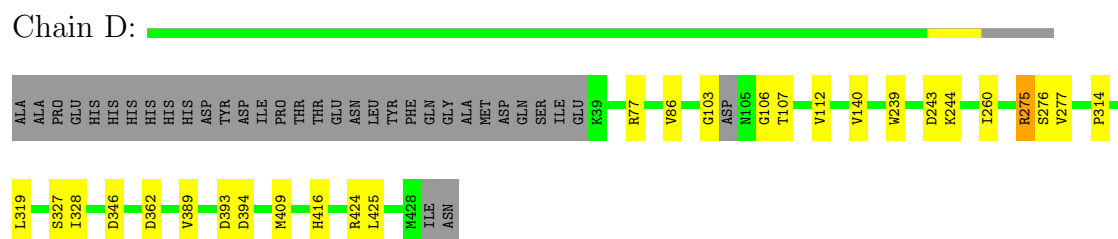
- Molecule 1: Lysosome membrane protein 2



- Molecule 1: Lysosome membrane protein 2

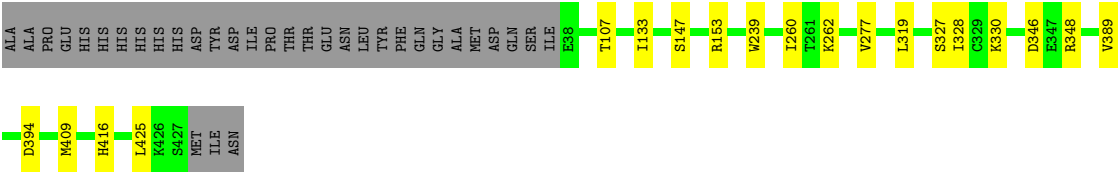


- Molecule 1: Lysosome membrane protein 2



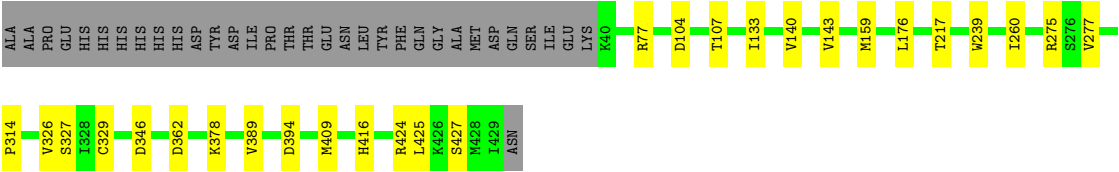
- Molecule 1: Lysosome membrane protein 2

Chain E: 



- Molecule 1: Lysosome membrane protein 2

Chain F: 



4 Data and refinement statistics

EDS failed to run properly - this section will therefore be incomplete.

Property	Value	Source
Space group	P 1 21 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	101.77Å 115.98Å 145.08Å 90.00° 96.38° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	34.64 – 3.00	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	99.9 (34.64-3.00)	Depositor
R_{merge}	0.10	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	2.60 (at 3.01Å)	Xtriage
Refinement program	BUSTER 2.10.0	Depositor
R, R_{free}	0.198 , 0.232	Depositor
Wilson B-factor (Å ²)	58.8	Xtriage
Anisotropy	0.321	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
L-test for twinning	$\langle L \rangle = 0.47$, $\langle L^2 \rangle = 0.29$	Xtriage
Outliers	1 of 67190 reflections (0.001%)	Xtriage
Total number of atoms	19810	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	84.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 3.12% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

5 Model quality

5.1 Standard geometry

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: PO4, PEG, NAG, BMA, MAN

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 >5	RMSZ	# Z >5
1	A	0.57	0/3174	0.77	0/4328
1	B	0.56	0/3155	0.77	2/4307 (0.0%)
1	C	0.53	0/3049	0.74	0/4158
1	D	0.52	0/3171	0.73	0/4322
1	E	0.59	0/3183	0.77	0/4338
1	F	0.54	0/3182	0.75	0/4338
All	All	0.55	0/18914	0.76	2/25791 (0.0%)

There are no bond length outliers.

All (2) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	B	152	LEU	CB-CA-C	-9.37	92.40	110.20
1	B	151	PHE	CB-CA-C	-6.11	98.18	110.40

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

5.2 Close contacts

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 hydrogens added by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes within the asymmetric unit, and the number in parentheses is this value normalized per 1000 atoms of the molecule in the chain. The Symm-Clashes column gives symmetry related clashes, in the same way as for the Clashes column.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	3093	0	0	2	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	B	3073	0	0	1	0
1	C	2969	0	0	3	0
1	D	3090	0	0	4	0
1	E	3100	0	0	2	0
1	F	3100	0	0	3	0
2	A	50	0	0	0	0
2	E	100	0	0	0	0
2	F	50	0	0	0	0
3	A	64	0	0	0	0
3	D	64	0	0	1	0
4	A	78	0	0	0	0
4	B	39	0	0	0	0
4	C	39	0	0	0	0
4	D	39	0	0	1	0
4	E	39	0	0	0	0
4	F	78	0	0	0	0
5	A	28	0	0	0	0
5	B	28	0	0	0	0
5	C	84	0	0	1	0
5	D	84	0	0	0	0
5	E	28	0	0	0	0
5	F	28	0	0	0	0
6	A	42	0	0	0	0
6	B	56	0	0	0	0
6	C	28	0	0	0	0
6	D	14	0	0	0	0
6	E	14	0	0	0	0
6	F	56	0	0	0	0
7	A	5	0	0	0	0
7	B	5	0	0	0	0
7	C	5	0	0	0	0
7	D	5	0	0	0	0
7	E	5	0	0	1	0
7	F	5	0	0	0	0
8	A	7	0	0	1	0
8	F	7	0	0	0	0
9	B	75	0	0	0	0
9	E	75	0	0	0	0
10	F	61	0	0	1	0
All	All	19810	0	0	16	0

Clashscore is defined as the number of clashes calculated for the entry per 1000 atoms (including hydrogens) of the entry. The overall clashscore for this entry is 1.

All (16) close contacts within the same asymmetric unit are listed below.

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:F:326:VAL:CG2	1:F:329:CYS:SG	2.86	0.64
1:D:103:GLY:O	1:D:106:GLY:N	2.36	0.59
1:D:275:ARG:NH1	1:D:276:SER:O	2.37	0.58
1:E:330:LYS:NZ	7:E:721:PO4:O3	2.38	0.56
1:A:241:ILE:CG2	1:B:351:SER:OG	2.54	0.56
5:C:710:NAG:N2	5:C:710:NAG:C5	2.72	0.53
1:C:336:ILE:N	1:C:386:ASN:O	2.48	0.46
1:F:362:ASP:O	10:F:705:NAG:O6	2.34	0.45
1:E:319:LEU:O	1:E:348:ARG:NH2	2.50	0.45
1:D:362:ASP:O	3:D:703:NAG:O6	2.35	0.44
1:A:381:LYS:NZ	8:A:722:PEG:O4	2.50	0.44
4:D:708:NAG:O3	4:D:709:NAG:O5	2.36	0.43
1:C:214:VAL:CG1	1:C:230:GLU:CB	2.99	0.41
1:D:243:ASP:OD1	1:D:244:LYS:N	2.55	0.40
1:C:275:ARG:NH2	1:C:301:ILE:O	2.55	0.40
1:F:424:ARG:O	1:F:427:SER:OG	2.40	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 X-ray entries followed by that with respect to entries of similar resolution. 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	391/423 (92%)	372 (95%)	19 (5%)	0	100	100
1	B	391/423 (92%)	369 (94%)	22 (6%)	0	100	100
1	C	372/423 (88%)	358 (96%)	14 (4%)	0	100	100
1	D	385/423 (91%)	366 (95%)	19 (5%)	0	100	100
1	E	388/423 (92%)	369 (95%)	19 (5%)	0	100	100
1	F	388/423 (92%)	371 (96%)	17 (4%)	0	100	100
All	All	2315/2538 (91%)	2205 (95%)	110 (5%)	0	100	100

There are no Ramachandran outliers to report.

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 X-ray entries followed by that with respect to entries of similar resolution. 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	328/380 (86%)	312 (95%)	16 (5%)	35	78
1	B	324/380 (85%)	309 (95%)	15 (5%)	37	80
1	C	313/380 (82%)	298 (95%)	15 (5%)	35	79
1	D	334/380 (88%)	313 (94%)	21 (6%)	25	66
1	E	335/380 (88%)	319 (95%)	16 (5%)	35	79
1	F	335/380 (88%)	313 (93%)	22 (7%)	24	64
All	All	1969/2280 (86%)	1864 (95%)	105 (5%)	32	74

All (105) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	77	ARG
1	A	107	THR
1	A	152	LEU
1	A	177	LEU
1	A	239	TRP
1	A	277	VAL
1	A	314	PRO
1	A	319	LEU
1	A	327	SER
1	A	328	ILE
1	A	346	ASP
1	A	389	VAL
1	A	394	ASP
1	A	409	MET
1	A	416	HIS
1	A	425	LEU
1	B	86	VAL
1	B	107	THR
1	B	140	VAL
1	B	159	MET
1	B	239	TRP
1	B	275	ARG
1	B	277	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	B	328	ILE
1	B	346	ASP
1	B	389	VAL
1	B	394	ASP
1	B	409	MET
1	B	410	TYR
1	B	416	HIS
1	B	425	LEU
1	C	107	THR
1	C	125	VAL
1	C	141	LEU
1	C	239	TRP
1	C	268	VAL
1	C	275	ARG
1	C	314	PRO
1	C	328	ILE
1	C	389	VAL
1	C	393	ASP
1	C	394	ASP
1	C	409	MET
1	C	410	TYR
1	C	416	HIS
1	C	425	LEU
1	D	77	ARG
1	D	86	VAL
1	D	107	THR
1	D	112	VAL
1	D	140	VAL
1	D	239	TRP
1	D	260	ILE
1	D	275	ARG
1	D	277	VAL
1	D	314	PRO
1	D	319	LEU
1	D	327	SER
1	D	328	ILE
1	D	346	ASP
1	D	389	VAL
1	D	393	ASP
1	D	394	ASP
1	D	409	MET
1	D	416	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	D	424	ARG
1	D	425	LEU
1	E	107	THR
1	E	133	ILE
1	E	147	SER
1	E	153	ARG
1	E	239	TRP
1	E	260	ILE
1	E	262	LYS
1	E	277	VAL
1	E	327	SER
1	E	328	ILE
1	E	346	ASP
1	E	389	VAL
1	E	394	ASP
1	E	409	MET
1	E	416	HIS
1	E	425	LEU
1	F	77	ARG
1	F	104	ASP
1	F	107	THR
1	F	133	ILE
1	F	140	VAL
1	F	143	VAL
1	F	159	MET
1	F	176	LEU
1	F	217	THR
1	F	239	TRP
1	F	260	ILE
1	F	275	ARG
1	F	277	VAL
1	F	314	PRO
1	F	327	SER
1	F	346	ASP
1	F	378	LYS
1	F	389	VAL
1	F	394	ASP
1	F	409	MET
1	F	416	HIS
1	F	425	LEU

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. There are no such sidechains identified.

5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA chains in this entry.

5.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains ⓘ

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

5.5 Carbohydrates ⓘ

87 carbohydrates are modelled in this entry.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds (or angles) for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds (or angles) that are observed in the model and the number of bonds (or angles) that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. 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 $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	$\# Z > 2$	Counts	RMSZ	$\# Z > 2$
2	NAG	A	701	1,2	12,14,15	0.31	0	15,19,21	0.61	0
2	NAG	A	702	2	12,14,15	0.32	0	15,19,21	0.56	0
2	BMA	A	703	2	10,11,12	0.36	0	11,15,17	0.48	0
2	MAN	A	704	2	10,11,12	0.33	0	11,15,17	0.56	0
3	NAG	A	705	1,3	12,14,15	0.32	0	15,19,21	1.19	3 (20%)
3	NAG	A	706	3	12,14,15	0.36	0	15,19,21	0.95	0
3	BMA	A	707	3	10,11,12	0.33	0	11,15,17	0.56	0
3	MAN	A	708	3	10,11,12	0.38	0	11,15,17	0.68	0
3	NAG	A	709	3	12,14,15	0.17	0	15,19,21	0.79	0
4	NAG	A	710	1,4	12,14,15	0.36	0	15,19,21	0.69	0
4	NAG	A	711	4	12,14,15	0.34	0	15,19,21	0.61	0
4	BMA	A	712	4	10,11,12	0.36	0	11,15,17	0.51	0
5	NAG	A	713	1,5	12,14,15	0.31	0	15,19,21	0.56	0
5	NAG	A	714	5	12,14,15	0.24	0	15,19,21	0.86	0
4	NAG	A	716	1,4	12,14,15	0.36	0	15,19,21	0.53	0
4	NAG	A	717	4	12,14,15	0.32	0	15,19,21	0.60	0
4	BMA	A	718	4	10,11,12	0.34	0	11,15,17	0.42	0
5	NAG	B	701	1,5	12,14,15	0.38	0	15,19,21	0.67	0
5	NAG	B	702	5	12,14,15	0.30	0	15,19,21	0.56	0
9	NAG	B	703	9,1	12,14,15	0.32	0	15,19,21	0.41	0
9	NAG	B	704	9	12,14,15	0.36	0	15,19,21	0.75	0
9	BMA	B	705	9	10,11,12	0.36	0	11,15,17	0.49	0

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
9	MAN	B	706	9	10,11,12	0.35	0	11,15,17	0.60	0
9	NAG	B	707	9	12,14,15	0.28	0	15,19,21	0.79	0
9	MAN	B	708	9	10,11,12	0.35	0	11,15,17	0.50	0
4	NAG	B	712	1,4	12,14,15	0.36	0	15,19,21	0.61	0
4	NAG	B	713	4	12,14,15	0.36	0	15,19,21	0.64	0
4	BMA	B	714	4	10,11,12	0.36	0	11,15,17	0.69	0
5	NAG	C	701	1,5	12,14,15	0.27	0	15,19,21	0.45	0
5	NAG	C	702	5	12,14,15	0.29	0	15,19,21	0.40	0
4	NAG	C	703	1,4	12,14,15	0.29	0	15,19,21	0.41	0
4	NAG	C	704	4	12,14,15	0.40	0	15,19,21	0.75	0
4	BMA	C	705	4	10,11,12	0.34	0	11,15,17	0.34	0
5	NAG	C	706	1,5	12,14,15	0.32	0	15,19,21	0.60	0
5	NAG	C	707	5	12,14,15	0.30	0	15,19,21	0.39	0
5	NAG	C	709	1,5	12,14,15	0.35	0	15,19,21	0.58	0
5	NAG	C	710	5	12,14,15	0.25	0	15,19,21	0.55	0
5	NAG	D	701	1,5	12,14,15	0.33	0	15,19,21	0.52	0
5	NAG	D	702	5	12,14,15	0.33	0	15,19,21	0.61	0
3	NAG	D	703	1,3	12,14,15	0.27	0	15,19,21	0.68	0
3	NAG	D	704	3	12,14,15	0.36	0	15,19,21	0.61	0
3	BMA	D	705	3	10,11,12	0.33	0	11,15,17	0.31	0
3	MAN	D	706	3	10,11,12	0.37	0	11,15,17	0.49	0
3	NAG	D	707	3	12,14,15	0.19	0	15,19,21	0.82	0
4	NAG	D	708	1,4	12,14,15	0.31	0	15,19,21	0.66	1 (6%)
4	NAG	D	709	4	12,14,15	0.34	0	15,19,21	0.50	0
4	BMA	D	710	4	10,11,12	0.37	0	11,15,17	0.41	0
5	NAG	D	711	1,5	12,14,15	0.30	0	15,19,21	0.46	0
5	NAG	D	712	5	12,14,15	0.25	0	15,19,21	0.36	0
5	NAG	D	713	1,5	12,14,15	0.33	0	15,19,21	0.63	0
5	NAG	D	714	5	12,14,15	0.22	0	15,19,21	0.59	0
2	NAG	E	701	1,2	12,14,15	0.30	0	15,19,21	0.55	0
2	NAG	E	702	2	12,14,15	0.32	0	15,19,21	0.93	1 (6%)
2	BMA	E	703	2	10,11,12	0.44	0	11,15,17	1.08	2 (18%)
2	MAN	E	704	2	10,11,12	0.35	0	11,15,17	0.81	0
9	NAG	E	705	9,1	12,14,15	0.29	0	15,19,21	0.43	0
9	NAG	E	706	9	12,14,15	0.35	0	15,19,21	0.60	0
9	BMA	E	707	9	10,11,12	0.33	0	11,15,17	0.53	0
9	MAN	E	708	9	10,11,12	0.36	0	11,15,17	0.46	0
9	NAG	E	709	9	12,14,15	0.22	0	15,19,21	0.71	0
9	MAN	E	710	9	10,11,12	0.37	0	11,15,17	0.54	0
5	NAG	E	711	1,5	12,14,15	0.31	0	15,19,21	0.65	0
5	NAG	E	712	5	12,14,15	0.37	0	15,19,21	0.79	0
4	NAG	E	713	1,4	12,14,15	0.34	0	15,19,21	1.01	1 (6%)

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
4	NAG	E	714	4	12,14,15	0.29	0	15,19,21	0.75	0
4	BMA	E	715	4	10,11,12	0.37	0	11,15,17	1.65	3 (27%)
2	NAG	E	716	1,2	12,14,15	0.30	0	15,19,21	0.51	0
2	NAG	E	717	2	12,14,15	0.27	0	15,19,21	0.47	0
2	BMA	E	718	2	10,11,12	0.34	0	11,15,17	0.46	0
2	MAN	E	719	2	10,11,12	0.34	0	11,15,17	0.99	0
2	NAG	F	701	1,2	12,14,15	0.36	0	15,19,21	0.55	0
2	NAG	F	702	2	12,14,15	0.39	0	15,19,21	0.53	0
2	BMA	F	703	2	10,11,12	0.39	0	11,15,17	1.08	2 (18%)
2	MAN	F	704	2	10,11,12	0.36	0	11,15,17	0.84	0
10	NAG	F	705	1,10	12,14,15	0.22	0	15,19,21	0.53	0
10	NAG	F	706	10	12,14,15	0.49	0	15,19,21	0.84	0
10	BMA	F	707	10	10,11,12	1.33	1 (10%)	11,15,17	1.11	1 (9%)
10	MAN	F	708	10	10,11,12	0.37	0	11,15,17	0.65	0
10	MAN	F	709	10	10,11,12	0.80	0	11,15,17	1.63	3 (27%)
4	NAG	F	710	1,4	12,14,15	0.28	0	15,19,21	0.55	0
4	NAG	F	711	4	12,14,15	0.31	0	15,19,21	0.56	0
4	BMA	F	712	4	10,11,12	0.37	0	11,15,17	0.29	0
5	NAG	F	713	1,5	12,14,15	0.28	0	15,19,21	0.49	0
5	NAG	F	714	5	12,14,15	0.24	0	15,19,21	0.57	0
4	NAG	F	716	1,4	12,14,15	0.34	0	15,19,21	0.86	0
4	NAG	F	717	4	12,14,15	0.27	0	15,19,21	0.54	0
4	BMA	F	718	4	10,11,12	0.35	0	11,15,17	0.32	0

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the chemical component dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	NAG	A	701	1,2	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	A	702	2	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	BMA	A	703	2	-	0/2/19/22	0/1/1/1
2	MAN	A	704	2	-	0/2/19/22	0/1/1/1
3	NAG	A	705	1,3	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NAG	A	706	3	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	BMA	A	707	3	-	0/2/19/22	0/1/1/1
3	MAN	A	708	3	-	0/2/19/22	0/1/1/1
3	NAG	A	709	3	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	A	710	1,4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	A	711	4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	BMA	A	712	4	-	0/2/19/22	0/1/1/1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
5	NAG	A	713	1,5	-	0/6/23/26	0/1/1/1
5	NAG	A	714	5	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	A	716	1,4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	A	717	4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	BMA	A	718	4	-	0/2/19/22	0/1/1/1
5	NAG	B	701	1,5	-	0/6/23/26	0/1/1/1
5	NAG	B	702	5	-	0/6/23/26	0/1/1/1
9	NAG	B	703	9,1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
9	NAG	B	704	9	-	0/6/23/26	0/1/1/1
9	BMA	B	705	9	-	0/2/19/22	0/1/1/1
9	MAN	B	706	9	-	0/2/19/22	0/1/1/1
9	NAG	B	707	9	-	0/6/23/26	0/1/1/1
9	MAN	B	708	9	-	0/2/19/22	0/1/1/1
4	NAG	B	712	1,4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	B	713	4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	BMA	B	714	4	-	0/2/19/22	0/1/1/1
5	NAG	C	701	1,5	-	0/6/23/26	0/1/1/1
5	NAG	C	702	5	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	C	703	1,4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	C	704	4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	BMA	C	705	4	-	0/2/19/22	0/1/1/1
5	NAG	C	706	1,5	-	0/6/23/26	0/1/1/1
5	NAG	C	707	5	-	0/6/23/26	0/1/1/1
5	NAG	C	709	1,5	-	0/6/23/26	0/1/1/1
5	NAG	C	710	5	-	0/6/23/26	1/1/1/1
5	NAG	D	701	1,5	-	0/6/23/26	0/1/1/1
5	NAG	D	702	5	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NAG	D	703	1,3	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NAG	D	704	3	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	BMA	D	705	3	-	0/2/19/22	0/1/1/1
3	MAN	D	706	3	-	0/2/19/22	0/1/1/1
3	NAG	D	707	3	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	D	708	1,4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	D	709	4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	BMA	D	710	4	-	0/2/19/22	0/1/1/1
5	NAG	D	711	1,5	-	0/6/23/26	0/1/1/1
5	NAG	D	712	5	-	0/6/23/26	0/1/1/1
5	NAG	D	713	1,5	-	0/6/23/26	0/1/1/1
5	NAG	D	714	5	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	E	701	1,2	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	E	702	2	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	BMA	E	703	2	-	0/2/19/22	0/1/1/1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	MAN	E	704	2	-	0/2/19/22	0/1/1/1
9	NAG	E	705	9,1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
9	NAG	E	706	9	-	0/6/23/26	0/1/1/1
9	BMA	E	707	9	-	0/2/19/22	0/1/1/1
9	MAN	E	708	9	-	0/2/19/22	0/1/1/1
9	NAG	E	709	9	-	0/6/23/26	0/1/1/1
9	MAN	E	710	9	-	0/2/19/22	0/1/1/1
5	NAG	E	711	1,5	-	0/6/23/26	0/1/1/1
5	NAG	E	712	5	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	E	713	1,4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	E	714	4	-	0/6/23/26	1/1/1/1
4	BMA	E	715	4	-	0/2/19/22	0/1/1/1
2	NAG	E	716	1,2	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	E	717	2	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	BMA	E	718	2	-	0/2/19/22	0/1/1/1
2	MAN	E	719	2	-	0/2/19/22	0/1/1/1
2	NAG	F	701	1,2	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	F	702	2	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	BMA	F	703	2	-	0/2/19/22	0/1/1/1
2	MAN	F	704	2	-	0/2/19/22	0/1/1/1
10	NAG	F	705	1,10	-	0/6/23/26	0/1/1/1
10	NAG	F	706	10	-	0/6/23/26	0/1/1/1
10	BMA	F	707	10	-	0/2/19/22	0/1/1/1
10	MAN	F	708	10	-	0/2/19/22	0/1/1/1
10	MAN	F	709	10	-	0/2/19/22	0/1/1/1
4	NAG	F	710	1,4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	F	711	4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	BMA	F	712	4	-	0/2/19/22	0/1/1/1
5	NAG	F	713	1,5	-	0/6/23/26	0/1/1/1
5	NAG	F	714	5	-	0/6/23/26	1/1/1/1
4	NAG	F	716	1,4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	F	717	4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	BMA	F	718	4	-	0/2/19/22	0/1/1/1

All (1) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
10	F	707	BMA	O6-C6	-4.05	1.24	1.42

All (17) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
4	E	715	BMA	C3-C4-C5	3.34	116.18	110.20
10	F	709	MAN	O5-C5-C6	3.24	110.38	106.98
10	F	707	BMA	O6-C6-C5	3.04	121.82	111.36
10	F	709	MAN	C4-C3-C2	2.97	114.49	110.50
10	F	709	MAN	O5-C5-C4	-2.84	107.05	110.65
4	E	715	BMA	O5-C5-C4	2.68	114.05	110.65
4	E	713	NAG	O4-C4-C3	-2.57	104.60	110.35
3	A	705	NAG	C2-N2-C7	2.46	127.23	123.09
4	E	715	BMA	C4-C3-C2	2.45	113.79	110.50
2	E	703	BMA	O3-C3-C2	-2.35	105.64	109.94
2	E	702	NAG	C3-C4-C5	2.17	114.09	110.20
2	E	703	BMA	C3-C4-C5	2.14	114.03	110.20
3	A	705	NAG	O3-C3-C2	2.09	113.48	109.09
3	A	705	NAG	C3-C2-N2	2.09	114.94	111.76
4	D	708	NAG	O5-C5-C6	-2.06	104.82	106.98
2	F	703	BMA	C4-C3-C2	2.06	113.27	110.50
2	F	703	BMA	C3-C4-C5	2.00	113.78	110.20

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

All (3) ring outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms
4	E	714	NAG	C1-C2-C3-C4-C5-O5
5	F	714	NAG	C1-C2-C3-C4-C5-O5
5	C	710	NAG	C1-C2-C3-C4-C5-O5

5.6 Ligand geometry ⓘ

23 ligands are modelled in this entry.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds (or angles) for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds (or angles) that are observed in the model and the number of bonds (or angles) that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. 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 $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	$\# Z > 2$	Counts	RMSZ	$\# Z > 2$
6	NAG	A	715	1	12,14,15	0.20	0	15,19,21	0.70	0
6	NAG	A	719	1	12,14,15	0.27	0	15,19,21	0.41	0

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
6	NAG	A	720	1	12,14,15	0.28	0	15,19,21	0.72	0
7	PO4	A	721	-	4,4,4	0.83	0	6,6,6	0.31	0
8	PEG	A	722	-	6,6,6	0.35	0	5,5,5	0.14	0
6	NAG	B	709	1	12,14,15	0.30	0	15,19,21	0.63	0
6	NAG	B	710	1	12,14,15	0.30	0	15,19,21	0.55	0
6	NAG	B	711	1	12,14,15	0.27	0	15,19,21	0.57	0
6	NAG	B	715	1	12,14,15	0.36	0	15,19,21	0.55	0
7	PO4	B	716	-	4,4,4	0.99	0	6,6,6	0.33	0
6	NAG	C	708	1	12,14,15	0.21	0	15,19,21	0.39	0
6	NAG	C	711	1	12,14,15	0.33	0	15,19,21	0.69	0
7	PO4	C	712	-	4,4,4	1.05	0	6,6,6	0.32	0
6	NAG	D	715	1	12,14,15	0.32	0	15,19,21	0.52	0
7	PO4	D	716	-	4,4,4	1.06	0	6,6,6	0.31	0
6	NAG	E	720	1	12,14,15	0.28	0	15,19,21	0.46	0
7	PO4	E	721	-	4,4,4	1.02	0	6,6,6	0.30	0
6	NAG	F	715	1	12,14,15	0.36	0	15,19,21	0.74	1 (6%)
6	NAG	F	719	1	12,14,15	0.24	0	15,19,21	0.38	0
6	NAG	F	720	1	12,14,15	0.25	0	15,19,21	0.43	0
6	NAG	F	721	1	12,14,15	0.36	0	15,19,21	0.52	0
7	PO4	F	722	-	4,4,4	1.21	0	6,6,6	0.31	0
8	PEG	F	723	-	6,6,6	0.22	0	5,5,5	0.17	0

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the chemical component dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
6	NAG	A	715	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
6	NAG	A	719	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
6	NAG	A	720	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
7	PO4	A	721	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
8	PEG	A	722	-	-	0/4/4/4	0/0/0/0
6	NAG	B	709	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
6	NAG	B	710	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
6	NAG	B	711	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
6	NAG	B	715	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
7	PO4	B	716	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
6	NAG	C	708	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
6	NAG	C	711	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
7	PO4	C	712	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
6	NAG	D	715	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
7	PO4	D	716	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
6	NAG	E	720	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
7	PO4	E	721	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
6	NAG	F	715	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
6	NAG	F	719	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
6	NAG	F	720	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
6	NAG	F	721	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
7	PO4	F	722	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
8	PEG	F	723	-	-	0/4/4/4	0/0/0/0

There are no bond length outliers.

All (1) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
6	F	715	NAG	C2-N2-C7	2.13	126.66	123.09

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

5.7 Other polymers ⓘ

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data ⓘ

6.1 Protein, DNA and RNA chains ⓘ

EDS failed to run properly - this section will therefore be empty.

6.2 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains ⓘ

EDS failed to run properly - this section will therefore be empty.

6.3 Carbohydrates ⓘ

EDS failed to run properly - this section will therefore be empty.

6.4 Ligands ⓘ

EDS failed to run properly - this section will therefore be empty.

6.5 Other polymers ⓘ

EDS failed to run properly - this section will therefore be empty.