



wwPDB EM Map/Model Validation Report ⓘ

Apr 10, 2016 – 01:42 PM BST

PDB ID : 1Q55
EMDB ID: : EMD-1052
Title : W-shaped trans interactions of cadherins model based on fitting C-cadherin (1L3W) to 3D map of desmosomes obtained by electron tomography
Authors : He, W.; Cowin, P.; Stokes, D.L.
Deposited on : 2003-08-06
Resolution : 30.00 Å(reported)

This is a wwPDB EM Map/Model Validation Report for a publicly released PDB/EMDB entry.
For rigid body fitted models, validation errors reported here could stem from errors in the original structure(s) used in the fitting.
We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org
A user guide is available at
<http://wwpdb.org/validation/2016/EMValidationReportHelp>

MolProbity : 4.02b-467
Mogul : 1.7.1 (RC1), CSD as537be (2016)
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et. al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : trunk27241

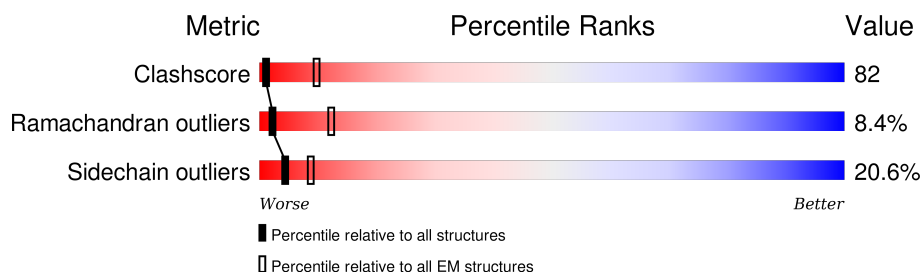
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

ELECTRON MICROSCOPY

The reported resolution of this entry is 30.00 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)	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	880	16% 30% 11% • 39%
1	B	880	16% 30% 11% • 39%
1	C	880	16% 30% 11% • 39%
1	D	880	17% 30% 11% • 39%

The following table lists non-polymeric compounds, carbohydrate monomers and non-standard residues in protein, DNA, RNA chains that are outliers for geometric or electron-density-fit criteria:

Mol	Type	Chain	Res	Chirality	Geometry	Clashes	Electron density
2	NAG	A	801	-	-	X	-
2	NAG	A	805	X	-	X	-
2	NAG	A	806	X	-	X	-

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Chirality	Geometry	Clashes	Electron density
2	NAG	A	807	-	-	X	-
2	NAG	A	809	-	-	X	-
2	NAG	A	810	-	-	X	-
2	NAG	A	904	-	-	X	-
2	NAG	B	801	-	-	X	-
2	NAG	B	805	X	-	X	-
2	NAG	B	806	X	-	X	-
2	NAG	B	807	-	-	X	-
2	NAG	B	809	-	-	X	-
2	NAG	B	810	-	-	X	-
2	NAG	B	904	-	-	X	-
2	NAG	C	801	-	-	X	-
2	NAG	C	805	X	-	X	-
2	NAG	C	806	X	-	X	-
2	NAG	C	807	-	-	X	-
2	NAG	C	809	-	-	X	-
2	NAG	C	810	-	-	X	-
2	NAG	C	904	-	-	X	-
2	NAG	D	801	-	-	X	-
2	NAG	D	805	X	-	X	-
2	NAG	D	806	X	-	X	-
2	NAG	D	807	-	-	X	-
2	NAG	D	809	-	-	X	-
2	NAG	D	810	-	-	X	-
2	NAG	D	904	-	-	X	-
3	NDG	A	902	-	-	X	-
3	NDG	B	902	-	-	X	-
3	NDG	C	902	-	-	X	-
3	NDG	D	902	-	-	X	-

2 Entry composition [i](#)

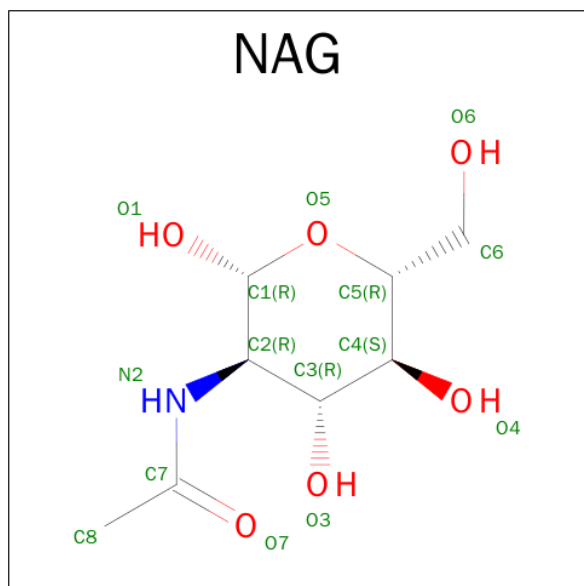
There are 4 unique types of molecules in this entry. The entry contains 17652 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

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 EP-cadherin.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
1	A	540	Total	C	N	O	S	0	0
			4191	2635	695	850	11		
1	B	540	Total	C	N	O	S	0	0
			4191	2635	695	850	11		
1	C	540	Total	C	N	O	S	0	0
			4191	2635	695	850	11		
1	D	540	Total	C	N	O	S	0	0
			4191	2635	695	850	11		

- Molecule 2 is SUGAR (N-ACETYL-D-GLUCOSAMINE) (three-letter code: NAG) (formula: $C_8H_{15}NO_6$).



Mol	Chain	Residues	Atoms				AltConf
2	A	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	A	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	

Continued on next page...

Continued from previous page...

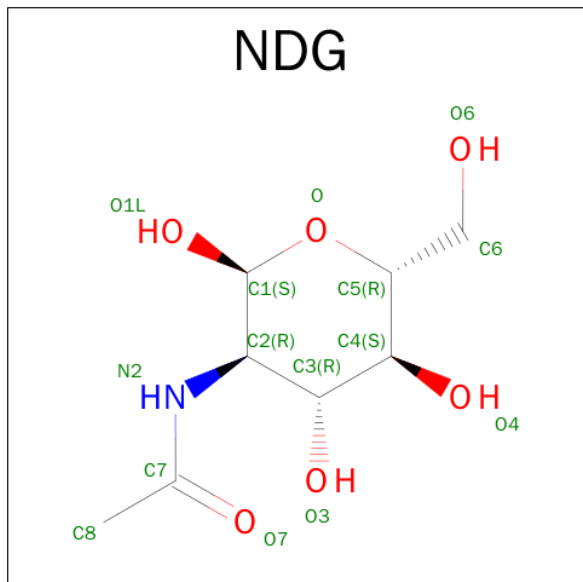
Mol	Chain	Residues	Atoms				AltConf
2	A	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	A	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	A	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	A	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	A	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	A	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	A	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	B	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	B	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	B	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	B	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	B	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	B	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	B	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	B	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	C	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms				AltConf
2	C	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	C	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	C	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	C	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	C	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	C	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	C	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	C	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	D	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	D	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	D	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	D	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	D	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	D	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	D	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	D	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	
2	D	1	Total	C	N	O	0
			154	88	11	55	

- Molecule 3 is SUGAR (2-(ACETYLAMINO)-2-DEOXY-A-D-GLUCOPYRANOSE) (three-letter code: NDG) (formula: $C_8H_{15}NO_6$).



Mol	Chain	Residues	Atoms				AltConf
3	A	1	Total	C	N	O	0
			56	32	4	20	
3	A	1	Total	C	N	O	0
			56	32	4	20	
3	A	1	Total	C	N	O	0
			56	32	4	20	
3	A	1	Total	C	N	O	0
			56	32	4	20	
3	B	1	Total	C	N	O	0
			56	32	4	20	
3	B	1	Total	C	N	O	0
			56	32	4	20	
3	B	1	Total	C	N	O	0
			56	32	4	20	
3	B	1	Total	C	N	O	0
			56	32	4	20	
3	C	1	Total	C	N	O	0
			56	32	4	20	
3	C	1	Total	C	N	O	0
			56	32	4	20	
3	C	1	Total	C	N	O	0
			56	32	4	20	

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms				AltConf
3	D	1	Total	C	N	O	0
			56	32	4	20	
3	D	1	Total	C	N	O	0
			56	32	4	20	
3	D	1	Total	C	N	O	0
			56	32	4	20	
3	D	1	Total	C	N	O	0
			56	32	4	20	

- Molecule 4 is CALCIUM ION (three-letter code: CA) (formula: Ca).

Mol	Chain	Residues	Atoms		AltConf
4	B	12	Total	Ca	0
			12	12	
4	A	12	Total	Ca	0
			12	12	
4	D	12	Total	Ca	0
			12	12	
4	C	12	Total	Ca	0
			12	12	

LEU
SER
SER
LEU
SER
ASN
SER
SER
SER
ASN
SER
ASN
ASP
GLU
GLU
HIS
HIS
ASP
TYR
GLY
TYR
LEU
LEU
SER
SER
ASP
TRP
GLY
SER
SER
PHE
PHE
ARG
LYS
LEU
LEU
ALA
ASP
MET
TYR
GLY
GLY
ASP
ASP
ASP
GLU
GLU

• Molecule 1: EP-cadherin

Chain B: 16% 30% 11% 39%

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

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

ALA
SER
LVS
ARG
HIS
ARG
SER
GLY
GLU
ALA
HIS
SER
SER
ARG
VAL
LEU
PHE
THR
PHE
PRO
GLU
THR
HIS
THR
VAL
VAL
LVS
ARG
LVS
VAL
LVS
ARG
D1
D2
D3
D4
D5
D6
D7
D8
D9
D10
D11
D12
D13
D14
D15
D16
D17
D18
D19
D20
D21
D22
D23
D24
D25
D26
D27
D28
D29
D30
D31
D32
D33
D34
D35
D36
D37
D38
D39
D40
D41
D42
D43
D44
D45
D46
D47
D48
D49
D50
D51
D52
D53
D54
D55
D56
D57
D58
D59
D60
D61
D62
D63
D64
D65
D66
D67
D68
D69
D70
D71
D72
D73
D74
D75
D76
D77
D78
D79
D80
D81
D82
D83
D84
D85
D86
D87
D88
D89
D90
D91
D92
D93
D94
D95
D96
D97
D98
D99
D100
D101
D102
D103
D104
D105
D106
D107
D108
D109
D110
D111
D112
D113
D114
D115
D116
D117
D118
D119
D120
D121
D122
D123
D124
D125
D126
D127
D128
D129
D130
D131
D132
D133
D134
D135
D136
D137
D138
D139
D140
D141
D142
D143
D144
D145
D146
D147
D148
D149
D150
D151
D152
D153
D154
D155
D156
D157
D158
D159
D160
D161
D162
D163
D164
D165
D166
D167
D168
D169
D170
D171
D172
D173
D174
D175
D176
D177
D178
D179
D180
D181
D182
D183
D184
D185
D186
D187
D188
D189
D190
D191
D192
D193
D194
D195
D196
D197
D198
D199
D200
D201
D202
D203
D204
D205
D206
D207
D208
D209
D210
D211
D212
D213
D214
D215
D216
D217
D218
D219
D220
D221
D222
D223
D224
D225
D226
D227
D228
D229
D230
D231
D232
D233
D234
D235
D236
D237
D238
D239
D240
D241
D242
D243
D244
D245
D246
D247
D248
D249
D250
D251
D252
D253
D254
D255
D256
D257
D258
D259
D260
D261
D262
D263
D264
D265
D266
D267
D268
D269
D270
D271
D272
D273
D274
D275
D276
D277
D278
D279
D280
D281
D282
D283
D284
D285
D286
D287
D288
D289
D290
D291
D292
D293
D294
D295
D296
D297
D298
D299
D300
D301
D302
D303
D304
D305
D306
D307
D308
D309
D310
D311
D312
D313
D314
D315
D316
D317
D318
D319
D320
D321
D322
D323
D324
D325
D326
D327
D328
D329
D330
D331
D332
D333
D334
D335
D336
D337
D338
D339
D340
D341
D342
D343
D344
D345
D346
D347
D348
D349
D350
D351
D352
D353
D354
D355
D356
D357
D358
D359
D360
D361
D362
D363
D364
D365
D366
D367
D368
D369
D370
D371
D372
D373
D374
D375
D376
D377
D378
D379
D380
D381
D382
D383
D384
D385
D386
D387
D388
D389
D390
D391
D392
D393
D394
D395
D396
D397
D398
D399
D400
D401
D402
D403
D404
D405
D406
D407
D408
D409
D410
D411
D412
D413
D414
D415
D416
D417
D418
D419
D420
D421
D422
D423
D424
D425
D426
D427
D428
D429
D430
D431
D432
D433
D434
D435
D436
D437
D438
D439
D440
D441
D442
D443
D444
D445
D446
D447
D448
D449
D450
D451
D452
D453
D454
D455
D456
D457
D458
D459
D460
D461
D462
D463
D464
D465
D466
D467
D468
D469
D470
D471
D472
D473
D474
D475
D476
D477
D478
D479
D480
D481
D482
D483
D484
D485
D486
D487
D488
D489
D490
D491
D492
D493
D494
D495
D496
D497
D498
D499
D500
D501
D502
D503
D504
D505
D506
D507
D508
D509
D510
D511
D512
D513
D514
D515
D516
D517
D518
D519
D520
D521
D522
D523
D524
D525
D526
D527
D528
D529
D530
D531
D532
D533
D534
D535
D536
D537
D538
D539
D540
D541
D542
D543
D544
D545
D546
D547
D548
D549
D550
D551
D552
D553
D554
D555
D556
D557
D558
D559
D560
D561
D562
D563
D564
D565
D566
D567
D568
D569
D570
D571
D572
D573
D574
D575
D576
D577
D578
D579
D580
D581
D582
D583
D584
D585
D586
D587
D588
D589
D590
D591
D592
D593
D594
D595
D596
D597
D598
D599
D600
D601
D602
D603
D604
D605
D606
D607
D608
D609
D610
D611
D612
D613
D614
D615
D616
D617
D618
D619
D620
D621
D622
D623
D624
D625
D626
D627
D628
D629
D630
D631
D632
D633
D634
D635
D636
D637
D638
D639
D640
D641
D642
D643
D644
D645
D646
D647
D648
D649
D650
D651
D652
D653
D654
D655
D656
D657
D658
D659
D660
D661
D662
D663
D664
D665
D666
D667
D668
D669
D670
D671
D672
D673
D674
D675
D676
D677
D678
D679
D680
D681
D682
D683
D684
D685
D686
D687
D688
D689
D690
D691
D692
D693
D694
D695
D696
D697
D698
D699
D700
D701
D702
D703
D704
D705
D706
D707
D708
D709
D710
D711
D712
D713
D714
D715
D716
D717
D718
D719
D720
D721
D722
D723
D724
D725
D726
D727
D728
D729
D730
D731
D732
D733
D734
D735
D736
D737
D738
D739
D740
D741
D742
D743
D744
D745
D746
D747
D748
D749
D750
D751
D752
D753
D754
D755
D756
D757
D758
D759
D760
D761
D762
D763
D764
D765
D766
D767
D768
D769
D770
D771
D772
D773
D774
D775
D776
D777
D778
D779
D780
D781
D782
D783
D784
D785
D786
D787
D788
D789
D790
D791
D792
D793
D794
D795
D796
D797
D798
D799
D800
D801
D802
D803
D804
D805
D806
D807
D808
D809
D810
D811
D812
D813
D814
D815
D816
D817
D818
D819
D820
D821
D822
D823
D824
D825
D826
D827
D828
D829
D830
D831
D832
D833
D834
D835
D836
D837
D838
D839
D840
D841
D842
D843
D844
D845
D846
D847
D848
D849
D850
D851
D852
D853
D854
D855
D856
D857
D858
D859
D860
D861
D862
D863
D864
D865
D866
D867
D868
D869
D870
D871
D872
D873
D874
D875
D876
D877
D878
D879
D880
D881
D882
D883
D884
D885
D886
D887
D888
D889
D890
D891
D892
D893
D894
D895
D896
D897
D898
D899
D900
D901
D902
D903
D904
D905
D906
D907
D908
D909
D910
D911
D912
D913
D914
D915
D916
D917
D918
D919
D920
D921
D922
D923
D924
D925
D926
D927
D928
D929
D930
D931
D932
D933
D934
D935
D936
D937
D938
D939
D940
D941
D942
D943
D944
D945
D946
D947
D948
D949
D950
D951
D952
D953
D954
D955
D956
D957
D958
D959
D960
D961
D962
D963
D964
D965
D966
D967
D968
D969
D970
D971
D972
D973
D974
D975
D976
D977
D978
D979
D980
D981
D982
D983
D984
D985
D986
D987
D988
D989
D990
D991
D992
D993
D994
D995
D996
D997
D998
D999
D1000
D1001
D1002
D1003
D1004
D1005
D1006
D1007
D1008
D1009
D1010
D1011
D1012
D1013
D1014
D1015
D1016
D1017
D1018
D1019
D1020
D1021
D1022
D1023
D1024
D1025
D1026
D1027
D1028
D1029
D1030
D1031
D1032
D1033
D1034
D1035
D1036
D1037
D1038
D1039
D1040
D1041
D1042
D1043
D1044
D1045
D1046
D1047
D1048
D1049
D1050
D1051
D1052
D1053
D1054
D1055
D1056
D1057
D1058
D1059
D1060
D1061
D1062
D1063
D1064
D1065
D1066
D1067
D1068
D1069
D1070
D1071
D1072
D1073
D1074
D1075
D1076
D1077
D1078
D1079
D1080
D1081
D1082
D1083
D1084
D1085
D1086
D1087
D1088
D1089
D1090
D1091
D1092
D1093
D1094
D1095
D1096
D1097
D1098
D1099
D1100
D1101
D1102
D1103
D1104
D1105
D1106
D1107
D1108
D1109
D1110
D1111
D1112
D1113
D1114
D1115
D1116
D1117
D1118
D1119
D1120
D1121
D1122
D1123
D1124
D1125
D1126
D1127
D1128
D1129
D1130
D1131
D1132
D1133
D1134
D1135
D1136
D1137
D1138
D1139
D1140
D1141
D1142
D1143
D1144
D1145
D1146
D1147
D1148
D1149
D1150
D1151
D1152
D1153
D1154
D1155
D1156
D1157
D1158
D1159
D1160
D1161
D1162
D1163
D1164
D1165
D1166
D1167
D1168
D1169
D1170
D1171
D1172
D1173
D1174
D1175
D1176
D1177
D1178
D1179
D1180
D1181
D1182
D1183
D1184
D1185
D1186
D1187
D1188
D1189
D1190
D1191
D1192
D1193
D1194
D1195
D1196
D1197
D1198
D1199
D1200
D1201
D1202
D1203
D1204
D1205
D1206
D1207
D1208
D1209
D1210
D1211
D1212
D1213
D1214
D1215
D1216
D1217
D1218
D1219
D1220
D1221
D1222
D1223
D1224
D1225
D1226
D1227
D1228
D1229
D1230
D1231
D1232
D1233
D1234
D1235
D1236
D1237
D1238
D1239
D1240
D1241
D1242
D1243
D1244
D1245
D1246
D1247
D1248
D1249
D1250
D1251
D1252
D1253
D1254
D1255
D1256
D1257
D1258
D1259
D1260
D1261
D1262
D1263
D1264
D1265
D1266
D1267
D1268
D1269
D1270
D1271
D1272
D1273
D1274
D1275
D1276
D1277
D1278
D1279
D1280
D1281
D1282
D1283
D1284
D1285
D1286
D1287
D1288
D1289
D1290
D1291
D1292
D1293
D1294
D1295
D1296
D1297
D1298
D1299
D1300
D1301
D1302
D1303
D1304
D1305
D1306
D1307
D1308
D1309
D1310
D1311
D1312
D1313
D1314
D1315
D1316
D1317
D1318
D1319
D1320
D1321
D1322
D1323
D1324
D1325
D1326
D1327
D1328
D1329
D1330
D1331
D1332
D1333
D1334
D1335
D1336
D1337
D1338
D1339
D1340
D1341
D1342
D1343
D1344
D1345
D1346
D1347
D1348
D1349
D1350
D1351
D1352
D1353
D1354
D1355
D1356
D1357
D1358
D1359
D1360
D1361
D1362
D1363
D1364
D1365
D1366
D1367
D1368
D1369
D1370
D1371
D1372
D1373
D1374
D1375
D1376
D1377
D1378
D1379
D1380
D1381
D1382
D1383
D1384
D1385
D1386
D1387
D1388
D1389
D1390
D1391
D1392
D1393
D1394
D1395
D1396
D1397
D1398
D1399
D1400
D1401
D1402
D1403
D1404
D1405
D1406
D1407
D1408
D1409
D1410
D1411
D1412
D1413
D1414
D1415
D1416
D1417
D1418
D1419
D1420
D1421
D1422
D1423
D1424
D1425
D1426
D1427
D1428
D1429
D1430
D1431
D1432
D1433
D1434
D1435
D1436
D1437
D1438
D1439
D1440
D1441
D1442
D1443
D1444
D1445
D1446
D1447
D1448
D1449
D1450
D1451
D1452
D1453
D1454
D1455
D1456
D1457
D1458
D1459
D1460
D1461
D1462
D1463
D1464
D1465
D1466
D1467
D1468
D1469
D1470
D1471
D1472
D1473
D1474
D1475
D1476
D1477
D1478
D1479
D1480
D1481
D1482
D1483
D1484
D1485
D1486
D1487
D1488
D1489
D1490
D1491
D1492
D1493
D1494
D1495
D1496
D1497
D1498
D1499
D1500
D1501
D1502
D1503
D1504
D1505
D1506
D1507
D1508
D1509
D1510
D1511
D1512
D1513
D1514
D1515
D1516
D1517
D1518
D1519
D1520
D1521
D1522
D1523
D1524
D1525
D1526
D1527
D1528
D1529
D1530
D1531
D1532
D1533
D1534
D1535
D1536
D1537
D1538
D1539
D1540
D1541
D1542
D1543
D1544
D1545
D1546
D1547
D1548
D1549
D1550
D1551
D1552
D1553
D1554
D1555
D1556
D1557
D1558
D1559
D1560
D1561
D1562
D1563
D1564
D1565
D1566
D1567
D1568
D1569
D1570
D1571
D1572
D1573
D1574
D1575
D1576
D1577
D1578
D1579
D1580
D1581
D1582
D1583
D1584
D1585
D1586
D1587
D1588
D1589
D1590
D1591
D1592
D1593
D1594
D1595
D1596
D1597
D1598
D1599
D1600
D1601
D1602
D1603
D1604
D1605
D1606
D1607
D1608
D1609
D1610
D1611
D1612
D1613
D1614
D1615
D1616
D1617
D1618
D1619
D1620
D1621
D1622
D1623
D1624
D1625
D1626
D1627
D1628
D1629
D1630
D1631
D1632
D1633
D1634
D1635
D1636
D1637
D1638
D1639
D1640
D1641
D1642
D1643
D1644
D1645
D1646
D1647
D1648
D1649
D1650
D1651
D1652
D1653
D1654
D1655
D1656
D1657
D1658
D1659
D1660
D1661
D1662
D1663
D1664
D1665
D1666
D1667
D1668
D1669
D1670
D1671
D1672
D1673
D1674
D1675
D1676
D1677
D1678
D1679
D1680
D1681
D1682
D1683
D1684
D1685
D1686
D1687
D1688
D1689
D1690
D1691
D1692
D1693
D1694
D1695
D1696
D1697
D1698
D1699
D1700
D1701
D1702
D1703
D1704
D1705
D1706
D1707
D1708
D1709
D1710
D1711
D1712
D1713
D1714
D1715
D1716
D1717
D1718
D1719
D1720
D1721
D1722
D1723
D1724
D1725
D1726
D1727
D1728
D1729
D1730
D1731
D1732
D1733
D1734
D1735
D1736
D1737
D1738
D1739

- Molecule 1: EP-cadherin

Chain D:

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




4 Experimental information

Property	Value	Source
Reconstruction method	TOMOGRAPHY	Depositor
Imposed symmetry	POINT, Not provided	Depositor
Number of images	Not provided	Depositor
Resolution determination method	Not provided	Depositor
CTF correction method	no CTF correction. Imaging at underfocus 0.4 micron with CM200FEG microscope at 50,000 magnification	Depositor
Microscope	FEI/PHILIPS CM200FEG/UT	Depositor
Voltage (kV)	200	Depositor
Electron dose ($e^-/\text{\AA}^2$)	120000	Depositor
Minimum defocus (nm)	300	Depositor
Maximum defocus (nm)	500	Depositor
Magnification	50000	Depositor
Image detector	GATAN 794	Depositor

5 Model quality ⓘ

5.1 Standard geometry ⓘ

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: CA, NAG, NDG

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	0.70	8/4276 (0.2%)	1.39	78/5839 (1.3%)
1	B	0.70	8/4276 (0.2%)	1.39	78/5839 (1.3%)
1	C	0.70	8/4276 (0.2%)	1.39	78/5839 (1.3%)
1	D	0.70	8/4276 (0.2%)	1.39	78/5839 (1.3%)
All	All	0.70	32/17104 (0.2%)	1.39	312/23356 (1.3%)

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	4
1	B	0	4
1	C	0	4
1	D	0	4
All	All	0	16

The worst 5 of 32 bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	B	335	ALA	CA-CB	-8.36	1.34	1.52
1	C	335	ALA	CA-CB	-8.34	1.34	1.52
1	A	335	ALA	CA-CB	-8.33	1.34	1.52
1	D	335	ALA	CA-CB	-8.33	1.34	1.52
1	D	539	CYS	CB-SG	8.16	1.96	1.82

The worst 5 of 312 bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	B	520	PRO	CA-C-N	-13.29	87.96	117.20
1	A	520	PRO	CA-C-N	-13.29	87.96	117.20
1	D	520	PRO	CA-C-N	-13.27	88.01	117.20
1	C	520	PRO	CA-C-N	-13.27	88.02	117.20
1	C	235	ILE	N-CA-C	12.74	145.40	111.00

There are no chirality outliers.

5 of 16 planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	17	PHE	Sidechain
1	A	18	PRO	Mainchain
1	A	222	ASP	Mainchain
1	A	520	PRO	Mainchain
1	B	17	PHE	Sidechain

5.2 Too-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 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	4191	0	4086	757	0
1	B	4191	0	4089	752	0
1	C	4191	0	4087	717	0
1	D	4191	0	4086	711	0
2	A	154	0	143	84	0
2	B	154	0	143	83	0
2	C	154	0	143	84	0
2	D	154	0	143	84	0
3	A	56	0	52	16	0
3	B	56	0	52	16	0
3	C	56	0	52	16	0
3	D	56	0	52	15	0
4	A	12	0	0	0	0
4	B	12	0	0	0	0
4	C	12	0	0	0	0
4	D	12	0	0	0	0
All	All	17652	0	17128	2836	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 82.

The worst 5 of 2836 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:B:464:ILE:HD12	1:B:465:PRO:CD	1.30	1.61
1:D:464:ILE:HD12	1:D:465:PRO:CD	1.30	1.59
1:A:464:ILE:HD12	1:A:465:PRO:CD	1.30	1.56
1:C:464:ILE:HD12	1:C:465:PRO:CD	1.30	1.56
1:C:24:ILE:HG21	1:D:2:TRP:CA	1.42	1.48

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	538/880 (61%)	401 (74%)	92 (17%)	45 (8%)	1	18
1	B	538/880 (61%)	401 (74%)	92 (17%)	45 (8%)	1	18
1	C	538/880 (61%)	401 (74%)	92 (17%)	45 (8%)	1	18
1	D	538/880 (61%)	401 (74%)	92 (17%)	45 (8%)	1	18
All	All	2152/3520 (61%)	1604 (74%)	368 (17%)	180 (8%)	2	18

5 of 180 Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	91	PRO
1	A	155	PRO
1	A	235	ILE
1	A	347	ARG
1	A	363	GLN

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	480/779 (62%)	381 (79%)	99 (21%)	1	10
1	B	480/779 (62%)	381 (79%)	99 (21%)	1	10
1	C	480/779 (62%)	381 (79%)	99 (21%)	1	10
1	D	480/779 (62%)	381 (79%)	99 (21%)	1	10
All	All	1920/3116 (62%)	1524 (79%)	396 (21%)	4	10

5 of 396 residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	B	447	MET
1	C	217	ASN
1	D	398	SER
1	B	466	PRO
1	C	27	ASN

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. 5 of 91 such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	B	455	GLN
1	C	110	GLN
1	D	391	ASN
1	B	467	ASN
1	C	27	ASN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates ⓘ

There are no carbohydrates in this entry.

5.6 Ligand geometry ⓘ

Of 108 ligands modelled in this entry, 48 are monoatomic - leaving 60 for Mogul analysis.

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	801	1	14,14,15	0.64	0	15,19,21	0.89	0
2	NAG	A	802	1	14,14,15	0.73	0	15,19,21	0.82	1 (6%)
2	NAG	A	803	1	14,14,15	0.91	1 (7%)	15,19,21	1.20	2 (13%)
3	NDG	A	804	1	14,14,15	0.62	0	15,19,21	0.82	0
2	NAG	A	805	1	14,14,15	0.69	0	15,19,21	1.17	1 (6%)
2	NAG	A	806	1	14,14,15	0.55	0	15,19,21	1.40	2 (13%)
2	NAG	A	807	1	14,14,15	0.64	0	15,19,21	1.13	1 (6%)
2	NAG	A	808	1	14,14,15	0.66	0	15,19,21	0.70	0
2	NAG	A	809	1	14,14,15	0.76	1 (7%)	15,19,21	0.96	1 (6%)
2	NAG	A	810	1	14,14,15	0.64	0	15,19,21	1.09	1 (6%)
3	NDG	A	811	1	14,14,15	0.82	0	15,19,21	2.17	1 (6%)
2	NAG	A	812	1	14,14,15	0.83	1 (7%)	15,19,21	0.75	1 (6%)
3	NDG	A	902	1	14,14,15	1.08	1 (7%)	15,19,21	0.96	0
3	NDG	A	903	1	14,14,15	0.51	0	15,19,21	0.64	0
2	NAG	A	904	1	14,14,15	0.76	1 (7%)	15,19,21	0.79	1 (6%)
2	NAG	B	801	1	14,14,15	0.63	0	15,19,21	0.88	0
2	NAG	B	802	1	14,14,15	0.72	0	15,19,21	0.82	1 (6%)
2	NAG	B	803	1	14,14,15	0.92	1 (7%)	15,19,21	1.20	2 (13%)
3	NDG	B	804	1	14,14,15	0.63	0	15,19,21	0.81	0
2	NAG	B	805	1	14,14,15	0.69	0	15,19,21	1.16	1 (6%)
2	NAG	B	806	1	14,14,15	0.55	0	15,19,21	1.41	2 (13%)
2	NAG	B	807	1	14,14,15	0.63	0	15,19,21	1.13	1 (6%)
2	NAG	B	808	1	14,14,15	0.67	0	15,19,21	0.69	0

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
2	NAG	B	809	1	14,14,15	0.77	1 (7%)	15,19,21	0.97	1 (6%)
2	NAG	B	810	1	14,14,15	0.63	0	15,19,21	1.09	2 (13%)
3	NDG	B	811	1	14,14,15	0.82	0	15,19,21	2.17	1 (6%)
2	NAG	B	812	1	14,14,15	0.82	1 (7%)	15,19,21	0.76	1 (6%)
3	NDG	B	902	1	14,14,15	1.07	1 (7%)	15,19,21	0.95	0
3	NDG	B	903	1	14,14,15	0.51	0	15,19,21	0.64	0
2	NAG	B	904	1	14,14,15	0.76	1 (7%)	15,19,21	0.78	1 (6%)
2	NAG	C	801	1	14,14,15	0.65	0	15,19,21	0.88	0
2	NAG	C	802	1	14,14,15	0.72	0	15,19,21	0.82	1 (6%)
2	NAG	C	803	1	14,14,15	0.92	1 (7%)	15,19,21	1.20	2 (13%)
3	NDG	C	804	1	14,14,15	0.62	0	15,19,21	0.82	0
2	NAG	C	805	1	14,14,15	0.68	0	15,19,21	1.16	1 (6%)
2	NAG	C	806	1	14,14,15	0.56	0	15,19,21	1.41	2 (13%)
2	NAG	C	807	1	14,14,15	0.63	0	15,19,21	1.14	1 (6%)
2	NAG	C	808	1	14,14,15	0.66	0	15,19,21	0.70	0
2	NAG	C	809	1	14,14,15	0.76	1 (7%)	15,19,21	0.97	1 (6%)
2	NAG	C	810	1	14,14,15	0.62	0	15,19,21	1.09	2 (13%)
3	NDG	C	811	1	14,14,15	0.82	0	15,19,21	2.16	1 (6%)
2	NAG	C	812	1	14,14,15	0.82	1 (7%)	15,19,21	0.76	1 (6%)
3	NDG	C	902	1	14,14,15	1.08	1 (7%)	15,19,21	0.96	0
3	NDG	C	903	1	14,14,15	0.51	0	15,19,21	0.64	0
2	NAG	C	904	1	14,14,15	0.77	1 (7%)	15,19,21	0.79	1 (6%)
2	NAG	D	801	1	14,14,15	0.66	0	15,19,21	0.88	0
2	NAG	D	802	1	14,14,15	0.71	0	15,19,21	0.83	1 (6%)
2	NAG	D	803	1	14,14,15	0.92	1 (7%)	15,19,21	1.20	2 (13%)
3	NDG	D	804	1	14,14,15	0.63	0	15,19,21	0.82	0
2	NAG	D	805	1	14,14,15	0.68	0	15,19,21	1.16	1 (6%)
2	NAG	D	806	1	14,14,15	0.54	0	15,19,21	1.41	2 (13%)
2	NAG	D	807	1	14,14,15	0.63	0	15,19,21	1.14	1 (6%)
2	NAG	D	808	1	14,14,15	0.66	0	15,19,21	0.69	0
2	NAG	D	809	1	14,14,15	0.75	1 (7%)	15,19,21	0.97	1 (6%)
2	NAG	D	810	1	14,14,15	0.62	0	15,19,21	1.09	2 (13%)
3	NDG	D	811	1	14,14,15	0.82	0	15,19,21	2.17	1 (6%)
2	NAG	D	812	1	14,14,15	0.83	1 (7%)	15,19,21	0.76	1 (6%)
3	NDG	D	902	1	14,14,15	1.08	1 (7%)	15,19,21	0.96	0
3	NDG	D	903	1	14,14,15	0.51	0	15,19,21	0.64	0

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
2	NAG	D	904	1	14,14,15	0.76	1 (7%)	15,19,21	0.79	1 (6%)

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	801	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	A	802	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	A	803	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NDG	A	804	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	A	805	1	1/1/5/7	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	A	806	1	1/1/5/7	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	A	807	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	A	808	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	A	809	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	A	810	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NDG	A	811	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	A	812	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NDG	A	902	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NDG	A	903	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	A	904	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	B	801	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	B	802	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	B	803	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NDG	B	804	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	B	805	1	1/1/5/7	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	B	806	1	1/1/5/7	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	B	807	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	B	808	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	B	809	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	B	810	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NDG	B	811	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	B	812	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NDG	B	902	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NDG	B	903	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	B	904	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	C	801	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	C	802	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	C	803	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NDG	C	804	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
2	NAG	C	805	1	1/1/5/7	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	C	806	1	1/1/5/7	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	C	807	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	C	808	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	C	809	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	C	810	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NDG	C	811	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	C	812	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NDG	C	902	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NDG	C	903	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	C	904	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	D	801	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	D	802	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	D	803	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NDG	D	804	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	D	805	1	1/1/5/7	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	D	806	1	1/1/5/7	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	D	807	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	D	808	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	D	809	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	D	810	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NDG	D	811	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	D	812	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NDG	D	902	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NDG	D	903	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	D	904	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1

The worst 5 of 20 bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	C	904	NAG	C1-C2	-2.45	1.49	1.52
2	D	904	NAG	C1-C2	-2.39	1.49	1.52
2	B	904	NAG	C1-C2	-2.39	1.49	1.52
2	A	904	NAG	C1-C2	-2.38	1.49	1.52
2	C	812	NAG	C1-C2	-2.32	1.49	1.52

The worst 5 of 51 bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
3	B	811	NDG	C2-N2-C7	-7.84	112.91	123.11
3	D	811	NDG	C2-N2-C7	-7.82	112.94	123.11
3	A	811	NDG	C2-N2-C7	-7.80	112.96	123.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
3	C	811	NDG	C2-N2-C7	-7.78	112.98	123.11
2	C	806	NAG	C2-N2-C7	-3.90	118.03	123.11

5 of 8 chirality outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atom
2	A	806	NAG	C1
2	D	806	NAG	C1
2	B	805	NAG	C1
2	A	805	NAG	C1
2	D	805	NAG	C1

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

52 monomers are involved in 398 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
2	A	801	NAG	21	0
2	A	803	NAG	4	0
3	A	804	NDG	2	0
2	A	805	NAG	7	0
2	A	806	NAG	11	0
2	A	807	NAG	17	0
2	A	808	NAG	2	0
2	A	809	NAG	8	0
2	A	810	NAG	13	0
3	A	811	NDG	6	0
2	A	812	NAG	3	0
3	A	902	NDG	8	0
2	A	904	NAG	8	0
2	B	801	NAG	20	0
2	B	803	NAG	4	0
3	B	804	NDG	2	0
2	B	805	NAG	7	0
2	B	806	NAG	11	0
2	B	807	NAG	17	0
2	B	808	NAG	2	0
2	B	809	NAG	8	0
2	B	810	NAG	13	0
3	B	811	NDG	6	0
2	B	812	NAG	3	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
3	B	902	NDG	8	0
2	B	904	NAG	8	0
2	C	801	NAG	21	0
2	C	803	NAG	4	0
3	C	804	NDG	2	0
2	C	805	NAG	7	0
2	C	806	NAG	12	0
2	C	807	NAG	16	0
2	C	808	NAG	2	0
2	C	809	NAG	8	0
2	C	810	NAG	13	0
3	C	811	NDG	6	0
2	C	812	NAG	3	0
3	C	902	NDG	8	0
2	C	904	NAG	8	0
2	D	801	NAG	21	0
2	D	803	NAG	4	0
3	D	804	NDG	2	0
2	D	805	NAG	7	0
2	D	806	NAG	12	0
2	D	807	NAG	16	0
2	D	808	NAG	2	0
2	D	809	NAG	8	0
2	D	810	NAG	13	0
3	D	811	NDG	5	0
2	D	812	NAG	3	0
3	D	902	NDG	8	0
2	D	904	NAG	8	0

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.