



Full wwPDB/EMDatabank EM Map/Model Validation Report ⓘ

Mar 2, 2017 – 11:24 am GMT

PDB ID : 3J1Q
EMDB ID: : EMD-5415
Title : Structure of AAV-DJ, a Retargeted Gene Therapy Vector: Cryo-Electron Microscopy at 4.5Å resolution
Authors : Lerch, T.F.; O'Donnell, J.K.; Meyer, N.L.; Xie, Q.; Taylor, K.A.; Stagg, S.M.; Chapman, M.S.
Deposited on : 2012-04-30
Resolution : 4.50 Å (reported)
Based on PDB ID : 1LP3

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

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

A user guide is available at

<http://wwpdb.org/validation/2016/EMValidationReportHelp>
with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

MolProbity : 4.02b-467
Percentile statistics : 20161228.v01 (using entries in the PDB archive December 28th 2016)
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et. al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : recalc29047

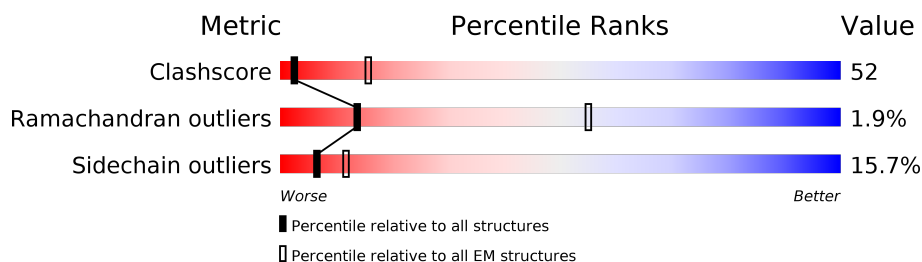
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

ELECTRON MICROSCOPY

The reported resolution of this entry is 4.50 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	125131	1336
Ramachandran outliers	121729	1120
Sidechain outliers	121581	1026

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	737	

2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 4136 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 Adeno-associated virus DJ.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S		
1	A	517	4136	2608	716	798	14	0	0

4 Experimental information

Property	Value	Source
Reconstruction method	SINGLE PARTICLE	Depositor
Imposed symmetry	POINT, I	Depositor
Number of particles used	27312	Depositor
Resolution determination method	FSC at 0.143 cut-off	Depositor
CTF correction method	CTF was estimated using Appion software	Depositor
Microscope	FEI TITAN KRIOS	Depositor
Voltage (kV)	300	Depositor
Electron dose ($e^-/\text{\AA}^2$)	Not provided	Depositor
Minimum defocus (nm)	Not provided	Depositor
Maximum defocus (nm)	Not provided	Depositor
Magnification	Not provided	Depositor
Image detector	Not provided	Depositor

5 Model quality [i](#)

5.1 Standard geometry [i](#)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 2$	RMSZ	$\# Z > 2$
1	A	0.49	0/4259	0.73	3/5806 (0.1%)

There are no bond length outliers.

All (3) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	266	GLY	N-CA-C	-10.12	87.80	113.10
1	A	265	SER	N-CA-C	8.57	134.13	111.00
1	A	267	GLY	N-CA-C	6.23	128.68	113.10

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

5.2 Too-close contacts [i](#)

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in the chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen atoms added and optimized by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes within the asymmetric unit, whereas Symm-Clashes lists symmetry related clashes.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	4136	0	3902	421	0
All	All	4136	0	3902	421	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 52.

All (421) close contacts within the same asymmetric unit are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:648:ILE:HD13	1:A:648:ILE:H	1.24	1.00
1:A:398:GLU:H	1:A:398:GLU:CD	1.63	0.99
1:A:440:ILE:HG22	1:A:441:ASP:H	1.25	0.98
1:A:265:SER:HB2	1:A:266:GLY:O	1.65	0.95
1:A:312:ARG:HB2	1:A:685:GLU:HB2	1.51	0.93
1:A:518:LEU:HD23	1:A:519:VAL:N	1.85	0.92
1:A:247:TRP:HE1	1:A:680:VAL:HG13	1.35	0.90
1:A:354:TYR:HE2	1:A:356:LEU:HB2	1.38	0.88
1:A:648:ILE:C	1:A:649:LEU:HD12	1.94	0.88
1:A:619:ILE:HG12	1:A:620:TRP:HE3	1.37	0.87
1:A:662:THR:HG22	1:A:663:PHE:H	1.43	0.84
1:A:397:LEU:HD23	1:A:397:LEU:H	1.42	0.84
1:A:367:PHE:HE2	1:A:369:ALA:HB3	1.43	0.84
1:A:320:ILE:HD12	1:A:320:ILE:N	1.93	0.83
1:A:435:LEU:H	1:A:435:LEU:HD12	1.42	0.83
1:A:263:SER:O	1:A:265:SER:N	2.11	0.82
1:A:376:GLN:HG2	1:A:377:TYR:H	1.45	0.82
1:A:245:ARG:HH11	1:A:245:ARG:HG3	1.45	0.81
1:A:423:HIS:HB2	1:A:639:PHE:HE1	1.44	0.81
1:A:230:CYS:HA	1:A:242:THR:HG23	1.61	0.81
1:A:442:GLN:OE1	1:A:475:GLN:HB3	1.81	0.80
1:A:518:LEU:HD22	1:A:520:ASN:HB2	1.64	0.79
1:A:439:LEU:C	1:A:440:ILE:HD13	2.04	0.79
1:A:648:ILE:HD13	1:A:648:ILE:N	1.98	0.79
1:A:252:TYR:CE2	1:A:376:GLN:HB2	2.17	0.78
1:A:449:ARG:HG2	1:A:449:ARG:HH11	1.47	0.78
1:A:289:PHE:CZ	1:A:619:ILE:HD12	2.19	0.78
1:A:355:VAL:H	1:A:647:GLN:HE22	1.32	0.78
1:A:225:SER:HB3	1:A:318:PHE:HB2	1.64	0.78
1:A:439:LEU:O	1:A:440:ILE:HD13	1.84	0.78
1:A:641:LEU:N	1:A:641:LEU:HD12	2.00	0.77
1:A:640:GLY:C	1:A:641:LEU:HD12	2.04	0.77
1:A:319:ASN:N	1:A:319:ASN:HD22	1.82	0.76
1:A:277:TYR:HB2	1:A:379:TYR:HE2	1.51	0.75
1:A:435:LEU:N	1:A:435:LEU:HD12	2.00	0.75
1:A:398:GLU:CD	1:A:398:GLU:N	2.38	0.75
1:A:343:GLN:O	1:A:650:ILE:HD12	1.87	0.74
1:A:405:LEU:HD12	1:A:406:ARG:H	1.51	0.74
1:A:249:LEU:HD13	1:A:250:PRO:N	2.03	0.73
1:A:245:ARG:HD3	1:A:365:PRO:HD2	1.71	0.73
1:A:432:LEU:O	1:A:435:LEU:HD11	1.88	0.73
1:A:376:GLN:HG2	1:A:377:TYR:N	2.03	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:405:LEU:HD11	1:A:409:ASN:HB3	1.71	0.72
1:A:269:SER:HB3	1:A:271:ASP:OD1	1.88	0.72
1:A:619:ILE:HG12	1:A:620:TRP:CE3	2.21	0.72
1:A:405:LEU:HD12	1:A:406:ARG:N	2.05	0.72
1:A:355:VAL:HG13	1:A:356:LEU:HD12	1.70	0.71
1:A:615:LEU:C	1:A:615:LEU:HD23	2.10	0.71
1:A:296:ARG:HG3	1:A:297:ASP:N	2.04	0.71
1:A:289:PHE:C	1:A:291:CYS:H	1.94	0.71
1:A:712:VAL:HG12	1:A:713:ASP:H	1.56	0.71
1:A:338:LEU:HD23	1:A:338:LEU:N	2.05	0.71
1:A:518:LEU:HD23	1:A:519:VAL:H	1.55	0.70
1:A:397:LEU:C	1:A:399:TYR:H	1.92	0.70
1:A:603:LEU:N	1:A:603:LEU:HD12	2.07	0.70
1:A:338:LEU:HD23	1:A:338:LEU:H	1.57	0.70
1:A:309:ARG:HB3	1:A:422:PHE:CD2	2.26	0.70
1:A:440:ILE:HG22	1:A:441:ASP:N	2.03	0.70
1:A:389:VAL:HG12	1:A:390:GLY:H	1.55	0.70
1:A:301:LEU:HD12	1:A:305:ASN:HD22	1.58	0.69
1:A:518:LEU:CD2	1:A:520:ASN:HB2	2.22	0.69
1:A:543:ILE:HD12	1:A:543:ILE:N	2.08	0.69
1:A:433:ASP:O	1:A:434:ARG:HD3	1.93	0.69
1:A:432:LEU:HD23	1:A:570:THR:HG22	1.73	0.69
1:A:405:LEU:CD1	1:A:409:ASN:HB3	2.22	0.69
1:A:662:THR:HG22	1:A:663:PHE:N	2.08	0.69
1:A:355:VAL:H	1:A:647:GLN:NE2	1.90	0.69
1:A:445:TYR:CE1	1:A:466:GLN:HG2	2.28	0.68
1:A:733:LEU:HD23	1:A:734:THR:N	2.07	0.68
1:A:571:ASN:HD21	1:A:608:TRP:HB2	1.59	0.68
1:A:341:THR:HG22	1:A:406:ARG:HA	1.74	0.68
1:A:344:VAL:HG23	1:A:649:LEU:O	1.94	0.68
1:A:560:MET:SD	1:A:726:ARG:HA	2.34	0.68
1:A:261:SER:O	1:A:263:SER:N	2.27	0.68
1:A:294:SER:HB3	1:A:297:ASP:OD1	1.94	0.68
1:A:290:HIS:HB3	1:A:615:LEU:HD21	1.75	0.67
1:A:296:ARG:O	1:A:299:GLN:HB3	1.95	0.67
1:A:415:TYR:OH	1:A:417:PHE:HA	1.94	0.67
1:A:314:SER:HB2	1:A:683:GLU:HB2	1.75	0.67
1:A:344:VAL:HB	1:A:650:ILE:HD13	1.76	0.67
1:A:290:HIS:HB3	1:A:615:LEU:CD2	2.24	0.67
1:A:389:VAL:HG12	1:A:390:GLY:N	2.09	0.67
1:A:437:ASN:OD1	1:A:439:LEU:N	2.27	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:247:TRP:NE1	1:A:680:VAL:HG13	2.08	0.66
1:A:649:LEU:N	1:A:649:LEU:HD12	2.10	0.66
1:A:320:ILE:CD1	1:A:320:ILE:N	2.58	0.66
1:A:337:ASN:HD22	1:A:340:SER:HB2	1.60	0.66
1:A:444:LEU:HD12	1:A:444:LEU:N	2.10	0.66
1:A:247:TRP:CZ3	1:A:677:THR:HA	2.31	0.66
1:A:602:VAL:HG23	1:A:606:MET:SD	2.36	0.66
1:A:622:LYS:HD3	1:A:644:PRO:HG2	1.77	0.66
1:A:240:ILE:HD12	1:A:240:ILE:N	2.11	0.65
1:A:283:TYR:HE2	1:A:376:GLN:O	1.79	0.65
1:A:536:PHE:HB2	1:A:537:PRO:HD2	1.77	0.65
1:A:461:THR:O	1:A:462:LEU:HD23	1.97	0.65
1:A:286:PHE:CD2	1:A:286:PHE:N	2.65	0.64
1:A:323:LYS:O	1:A:674:GLN:HB2	1.96	0.64
1:A:260:ILE:N	1:A:260:ILE:HD12	2.13	0.64
1:A:397:LEU:HD23	1:A:397:LEU:N	2.10	0.64
1:A:449:ARG:HG2	1:A:449:ARG:NH1	2.13	0.64
1:A:641:LEU:HD22	1:A:644:PRO:HA	1.80	0.64
1:A:317:LEU:HD23	1:A:317:LEU:C	2.18	0.64
1:A:672:ILE:N	1:A:672:ILE:HD12	2.13	0.64
1:A:672:ILE:H	1:A:672:ILE:HD12	1.63	0.63
1:A:274:TYR:HD2	1:A:274:TYR:N	1.95	0.63
1:A:275:PHE:CE1	1:A:388:ALA:HB2	2.33	0.63
1:A:542:LEU:C	1:A:543:ILE:HD12	2.19	0.63
1:A:519:VAL:HG23	1:A:519:VAL:O	1.99	0.63
1:A:687:GLU:C	1:A:688:LEU:HD23	2.20	0.62
1:A:422:PHE:HE2	1:A:687:GLU:HB3	1.64	0.62
1:A:686:TRP:N	1:A:686:TRP:CD1	2.68	0.62
1:A:712:VAL:HG12	1:A:713:ASP:N	2.15	0.62
1:A:281:TRP:CG	1:A:397:LEU:HD11	2.34	0.62
1:A:274:TYR:CD2	1:A:274:TYR:N	2.67	0.61
1:A:332:LYS:HD2	1:A:334:ILE:HD11	1.82	0.61
1:A:355:VAL:CG1	1:A:356:LEU:HD12	2.30	0.61
1:A:365:PRO:HB2	1:A:367:PHE:O	2.00	0.61
1:A:438:PRO:HG2	1:A:439:LEU:HD23	1.81	0.61
1:A:526:ALA:HB3	1:A:573:VAL:HA	1.82	0.61
1:A:298:TRP:O	1:A:302:ILE:HG12	2.00	0.61
1:A:534:LYS:HE3	1:A:535:PHE:CE1	2.36	0.61
1:A:286:PHE:HD2	1:A:286:PHE:N	1.98	0.61
1:A:306:TRP:CZ2	1:A:691:GLU:HG2	2.35	0.61
1:A:248:ALA:HA	1:A:677:THR:HG22	1.83	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:397:LEU:CD2	1:A:397:LEU:H	2.12	0.60
1:A:441:ASP:OD1	1:A:469:PRO:HD3	2.01	0.60
1:A:397:LEU:C	1:A:399:TYR:N	2.55	0.60
1:A:334:ILE:HD12	1:A:334:ILE:N	2.17	0.60
1:A:242:THR:HA	1:A:682:VAL:O	2.01	0.60
1:A:281:TRP:CD2	1:A:397:LEU:HD11	2.37	0.60
1:A:249:LEU:C	1:A:249:LEU:HD13	2.22	0.60
1:A:380:LEU:HD12	1:A:380:LEU:N	2.16	0.60
1:A:247:TRP:HB2	1:A:374:ILE:HD11	1.83	0.59
1:A:509:LYS:HA	1:A:519:VAL:HG13	1.84	0.59
1:A:700:ILE:C	1:A:700:ILE:HD12	2.23	0.59
1:A:249:LEU:HD12	1:A:652:ASN:ND2	2.18	0.59
1:A:487:GLN:HE22	1:A:540:GLY:N	2.00	0.59
1:A:281:TRP:CE2	1:A:651:LYS:HD3	2.37	0.59
1:A:283:TYR:O	1:A:374:ILE:HG23	2.02	0.59
1:A:338:LEU:CD2	1:A:338:LEU:H	2.15	0.59
1:A:735:ARG:HD3	1:A:736:ASN:O	2.03	0.59
1:A:367:PHE:CE2	1:A:369:ALA:HB3	2.33	0.58
1:A:289:PHE:O	1:A:291:CYS:N	2.36	0.58
1:A:432:LEU:HA	1:A:435:LEU:HD21	1.84	0.58
1:A:310:PRO:HB3	1:A:686:TRP:CE3	2.39	0.58
1:A:567:ILE:C	1:A:569:THR:N	2.56	0.58
1:A:367:PHE:CG	1:A:368:PRO:HD2	2.39	0.58
1:A:353:PRO:HG2	1:A:379:TYR:HD1	1.69	0.58
1:A:432:LEU:CD2	1:A:570:THR:HG22	2.34	0.58
1:A:249:LEU:O	1:A:675:TYR:HB2	2.03	0.58
1:A:567:ILE:C	1:A:569:THR:H	2.07	0.58
1:A:616:GLN:OE1	1:A:727:PRO:HA	2.04	0.57
1:A:337:ASN:ND2	1:A:340:SER:HB2	2.18	0.57
1:A:252:TYR:HB3	1:A:376:GLN:HE21	1.70	0.57
1:A:355:VAL:N	1:A:647:GLN:HE22	2.02	0.57
1:A:274:TYR:HD2	1:A:274:TYR:H	1.51	0.57
1:A:428:HIS:HD2	1:A:737:LEU:HG	1.69	0.57
1:A:354:TYR:CE2	1:A:356:LEU:HB2	2.30	0.57
1:A:289:PHE:HE1	1:A:619:ILE:HA	1.68	0.57
1:A:289:PHE:CE1	1:A:619:ILE:HB	2.40	0.57
1:A:344:VAL:HG22	1:A:345:PHE:N	2.20	0.57
1:A:561:ILE:HG22	1:A:562:THR:N	2.20	0.57
1:A:289:PHE:C	1:A:291:CYS:N	2.58	0.56
1:A:667:LYS:HE3	1:A:667:LYS:C	2.24	0.56
1:A:260:ILE:O	1:A:275:PHE:HA	2.06	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:322:VAL:HG11	1:A:340:SER:HB3	1.87	0.56
1:A:306:TRP:HE1	1:A:691:GLU:CG	2.18	0.56
1:A:319:ASN:ND2	1:A:319:ASN:N	2.50	0.56
1:A:356:LEU:N	1:A:356:LEU:HD12	2.21	0.56
1:A:263:SER:C	1:A:265:SER:N	2.55	0.56
1:A:688:LEU:HD23	1:A:688:LEU:N	2.20	0.56
1:A:245:ARG:NH1	1:A:245:ARG:HG3	2.17	0.56
1:A:512:LEU:C	1:A:512:LEU:HD13	2.26	0.56
1:A:602:VAL:HA	1:A:606:MET:SD	2.46	0.56
1:A:245:ARG:HH11	1:A:245:ARG:CG	2.18	0.55
1:A:367:PHE:CD1	1:A:368:PRO:HD2	2.42	0.55
1:A:566:GLU:H	1:A:566:GLU:CD	2.09	0.55
1:A:511:HIS:NE2	1:A:514:GLY:HA2	2.21	0.55
1:A:525:MET:HG2	1:A:574:ALA:HB2	1.87	0.55
1:A:507:ALA:HA	1:A:538:GLN:OE1	2.06	0.55
1:A:583:THR:OG1	1:A:593:ALA:HB1	2.06	0.55
1:A:724:GLU:OE2	1:A:724:GLU:N	2.40	0.55
1:A:379:TYR:H	1:A:379:TYR:HD2	1.56	0.54
1:A:320:ILE:CD1	1:A:320:ILE:H	2.20	0.54
1:A:733:LEU:HD23	1:A:733:LEU:C	2.28	0.54
1:A:244:THR:O	1:A:245:ARG:HG3	2.08	0.54
1:A:286:PHE:H	1:A:286:PHE:HD2	1.56	0.54
1:A:590:ARG:HH11	1:A:590:ARG:HA	1.72	0.54
1:A:510:TYR:HD2	1:A:519:VAL:HG12	1.72	0.54
1:A:344:VAL:HG22	1:A:345:PHE:H	1.73	0.54
1:A:363:CYS:SG	1:A:364:LEU:O	2.59	0.54
1:A:479:TRP:N	1:A:479:TRP:CD1	2.74	0.54
1:A:288:ARG:NH2	1:A:363:CYS:SG	2.81	0.54
1:A:510:TYR:C	1:A:510:TYR:CD1	2.81	0.54
1:A:702:TYR:HB2	1:A:732:TYR:CE1	2.44	0.53
1:A:447:LEU:HD12	1:A:448:SER:N	2.23	0.53
1:A:306:TRP:NE1	1:A:691:GLU:CG	2.71	0.53
1:A:313:LEU:HD12	1:A:314:SER:N	2.23	0.53
1:A:372:PHE:CD2	1:A:372:PHE:N	2.77	0.53
1:A:487:GLN:HG2	1:A:508:THR:HG21	1.91	0.53
1:A:650:ILE:HG13	1:A:651:LYS:N	2.23	0.53
1:A:405:LEU:HD11	1:A:409:ASN:O	2.09	0.52
1:A:560:MET:SD	1:A:727:PRO:HD3	2.49	0.52
1:A:259:GLN:C	1:A:260:ILE:HD12	2.29	0.52
1:A:555:ASP:CG	1:A:556:ILE:H	2.12	0.52
1:A:566:GLU:C	1:A:567:ILE:HD13	2.29	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:712:VAL:HB	1:A:715:ALA:HB2	1.90	0.52
1:A:332:LYS:HD2	1:A:332:LYS:O	2.09	0.52
1:A:367:PHE:HE2	1:A:369:ALA:CB	2.20	0.52
1:A:287:ASN:HD21	1:A:620:TRP:H	1.58	0.52
1:A:320:ILE:HD12	1:A:320:ILE:H	1.71	0.52
1:A:285:ASP:O	1:A:363:CYS:HA	2.10	0.52
1:A:298:TRP:CH2	1:A:615:LEU:HA	2.44	0.51
1:A:542:LEU:HB2	1:A:562:THR:HG21	1.90	0.51
1:A:484:CYS:HG	1:A:578:TYR:HD1	1.59	0.51
1:A:297:ASP:O	1:A:300:ARG:HB3	2.10	0.51
1:A:248:ALA:O	1:A:374:ILE:HD13	2.10	0.51
1:A:735:ARG:HG2	1:A:736:ASN:N	2.26	0.51
1:A:298:TRP:CZ3	1:A:615:LEU:HA	2.45	0.51
1:A:600:GLN:HG3	1:A:601:GLY:O	2.11	0.51
1:A:619:ILE:HG23	1:A:620:TRP:CE3	2.46	0.51
1:A:374:ILE:HD12	1:A:374:ILE:N	2.26	0.51
1:A:423:HIS:ND1	1:A:423:HIS:C	2.63	0.51
1:A:372:PHE:N	1:A:372:PHE:HD2	2.08	0.51
1:A:243:SER:HB3	1:A:245:ARG:NH1	2.26	0.50
1:A:315:PHE:C	1:A:315:PHE:CD1	2.85	0.50
1:A:449:ARG:HB2	1:A:463:GLY:CA	2.41	0.50
1:A:525:MET:HE1	1:A:572:PRO:HB2	1.92	0.50
1:A:440:ILE:CG2	1:A:441:ASP:H	2.08	0.50
1:A:487:GLN:HA	1:A:508:THR:HG21	1.92	0.50
1:A:423:HIS:HB2	1:A:639:PHE:CE1	2.35	0.50
1:A:490:VAL:HG22	1:A:491:SER:N	2.27	0.50
1:A:556:ILE:O	1:A:559:VAL:HG22	2.11	0.50
1:A:283:TYR:HB3	1:A:649:LEU:HG	1.94	0.50
1:A:510:TYR:CD2	1:A:519:VAL:HG12	2.46	0.50
1:A:631:HIS:C	1:A:633:SER:H	2.14	0.50
1:A:325:VAL:HG12	1:A:673:THR:O	2.12	0.50
1:A:535:PHE:N	1:A:535:PHE:CD1	2.78	0.50
1:A:731:ARG:HH11	1:A:731:ARG:HG3	1.77	0.50
1:A:288:ARG:HA	1:A:617:GLY:O	2.12	0.49
1:A:512:LEU:HD22	1:A:513:ASN:N	2.26	0.49
1:A:354:TYR:HA	1:A:647:GLN:HE22	1.77	0.49
1:A:620:TRP:CZ2	1:A:645:PRO:HG3	2.47	0.49
1:A:534:LYS:HE3	1:A:535:PHE:HE1	1.78	0.49
1:A:245:ARG:CG	1:A:245:ARG:NH1	2.74	0.49
1:A:444:LEU:N	1:A:444:LEU:CD1	2.74	0.49
1:A:327:GLN:OE1	1:A:332:LYS:HG2	2.13	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:424:SER:HB2	1:A:426:TYR:CE2	2.47	0.49
1:A:566:GLU:CD	1:A:566:GLU:N	2.66	0.48
1:A:695:ARG:NH2	1:A:699:GLU:HA	2.28	0.48
1:A:424:SER:HB2	1:A:426:TYR:CZ	2.47	0.48
1:A:449:ARG:HB2	1:A:463:GLY:HA3	1.95	0.48
1:A:695:ARG:HE	1:A:697:ASN:HD22	1.60	0.48
1:A:306:TRP:HE1	1:A:691:GLU:HG3	1.76	0.48
1:A:555:ASP:OD2	1:A:556:ILE:HG22	2.13	0.48
1:A:648:ILE:N	1:A:648:ILE:CD1	2.68	0.48
1:A:258:LYS:O	1:A:277:TYR:CD2	2.66	0.48
1:A:277:TYR:HB2	1:A:379:TYR:CE2	2.41	0.48
1:A:602:VAL:HG22	1:A:603:LEU:N	2.29	0.48
1:A:354:TYR:HA	1:A:647:GLN:NE2	2.28	0.48
1:A:342:ILE:HG22	1:A:652:ASN:HA	1.95	0.48
1:A:525:MET:HA	1:A:525:MET:HE2	1.94	0.48
1:A:346:THR:HG22	1:A:648:ILE:HG22	1.94	0.48
1:A:449:ARG:HB2	1:A:463:GLY:H	1.78	0.48
1:A:631:HIS:O	1:A:633:SER:N	2.46	0.48
1:A:365:PRO:C	1:A:367:PHE:N	2.66	0.48
1:A:623:ILE:HG13	1:A:641:LEU:H	1.79	0.48
1:A:695:ARG:HE	1:A:697:ASN:ND2	2.12	0.48
1:A:269:SER:HB2	1:A:272:ASN:HB2	1.96	0.48
1:A:298:TRP:O	1:A:301:LEU:HB3	2.14	0.48
1:A:287:ASN:ND2	1:A:619:ILE:HG23	2.29	0.48
1:A:699:GLU:H	1:A:699:GLU:CD	2.17	0.48
1:A:349:GLU:HG3	1:A:351:GLN:OE1	2.14	0.47
1:A:449:ARG:HB2	1:A:463:GLY:N	2.29	0.47
1:A:544:PHE:O	1:A:560:MET:N	2.46	0.47
1:A:523:PRO:HA	1:A:635:LEU:HD22	1.96	0.47
1:A:554:VAL:HG12	1:A:558:LYS:HG3	1.96	0.47
1:A:662:THR:CG2	1:A:663:PHE:N	2.78	0.47
1:A:246:THR:HG23	1:A:679:GLN:HG3	1.95	0.47
1:A:486:ARG:HE	1:A:577:GLN:HA	1.79	0.47
1:A:290:HIS:CE1	1:A:366:PRO:HG3	2.50	0.47
1:A:612:ASP:HB2	1:A:731:ARG:CZ	2.44	0.47
1:A:541:VAL:HB	1:A:562:THR:OG1	2.15	0.47
1:A:590:ARG:HB2	1:A:590:ARG:NH1	2.29	0.47
1:A:527:SER:HB2	1:A:564:GLU:HB2	1.96	0.47
1:A:600:GLN:OE1	1:A:601:GLY:N	2.48	0.47
1:A:325:VAL:O	1:A:325:VAL:HG13	2.15	0.47
1:A:395:TYR:CD1	1:A:395:TYR:N	2.83	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:415:TYR:HH	1:A:417:PHE:HA	1.77	0.47
1:A:502:TYR:CD1	1:A:502:TYR:C	2.87	0.47
1:A:554:VAL:CG1	1:A:558:LYS:HG3	2.44	0.47
1:A:543:ILE:CD1	1:A:543:ILE:N	2.77	0.47
1:A:737:LEU:HD23	1:A:737:LEU:C	2.35	0.47
1:A:571:ASN:ND2	1:A:608:TRP:HB2	2.28	0.46
1:A:696:TRP:CD1	1:A:696:TRP:C	2.88	0.46
1:A:502:TYR:HD1	1:A:502:TYR:C	2.18	0.46
1:A:481:PRO:O	1:A:606:MET:HG2	2.16	0.46
1:A:306:TRP:CE2	1:A:691:GLU:HG2	2.51	0.46
1:A:294:SER:N	1:A:297:ASP:OD2	2.49	0.46
1:A:347:ASP:OD2	1:A:351:GLN:N	2.48	0.46
1:A:389:VAL:CG1	1:A:390:GLY:N	2.79	0.46
1:A:488:GLN:HA	1:A:488:GLN:NE2	2.31	0.46
1:A:228:TRP:CE2	1:A:244:THR:HB	2.50	0.46
1:A:313:LEU:HD12	1:A:683:GLU:O	2.15	0.46
1:A:377:TYR:CD1	1:A:378:GLY:N	2.84	0.46
1:A:415:TYR:CG	1:A:416:THR:N	2.84	0.46
1:A:716:VAL:HG12	1:A:721:VAL:C	2.36	0.46
1:A:717:ASN:C	1:A:719:GLU:H	2.19	0.46
1:A:438:PRO:HG2	1:A:439:LEU:CD2	2.44	0.46
1:A:396:CYS:HB3	1:A:398:GLU:HG2	1.97	0.45
1:A:663:PHE:CD2	1:A:664:ASN:N	2.83	0.45
1:A:429:SER:O	1:A:430:GLN:HG3	2.16	0.45
1:A:309:ARG:HD3	1:A:422:PHE:CZ	2.50	0.45
1:A:258:LYS:O	1:A:277:TYR:HD2	2.00	0.45
1:A:288:ARG:CZ	1:A:290:HIS:CE1	2.99	0.45
1:A:309:ARG:HD2	1:A:420:VAL:O	2.17	0.45
1:A:655:VAL:O	1:A:671:PHE:HB3	2.16	0.45
1:A:293:PHE:N	1:A:293:PHE:CD1	2.85	0.45
1:A:724:GLU:HA	1:A:725:PRO:HD3	1.69	0.45
1:A:290:HIS:HB3	1:A:615:LEU:HD23	1.96	0.45
1:A:433:ASP:HA	1:A:477:LYS:HE3	1.98	0.45
1:A:249:LEU:N	1:A:676:SER:O	2.50	0.45
1:A:353:PRO:HG2	1:A:379:TYR:CD1	2.50	0.44
1:A:275:PHE:CD1	1:A:388:ALA:HB2	2.52	0.44
1:A:649:LEU:N	1:A:649:LEU:CD1	2.76	0.44
1:A:287:ASN:HB2	1:A:356:LEU:HD23	1.98	0.44
1:A:239:VAL:HG13	1:A:239:VAL:O	2.16	0.44
1:A:518:LEU:HD23	1:A:519:VAL:C	2.38	0.44
1:A:249:LEU:HA	1:A:249:LEU:HD22	1.74	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:630:PHE:O	1:A:631:HIS:C	2.56	0.44
1:A:714:PHE:CZ	1:A:725:PRO:HD2	2.53	0.44
1:A:269:SER:HB3	1:A:271:ASP:CG	2.38	0.44
1:A:436:MET:SD	1:A:436:MET:N	2.89	0.44
1:A:249:LEU:C	1:A:249:LEU:CD1	2.84	0.44
1:A:288:ARG:C	1:A:291:CYS:SG	2.96	0.44
1:A:240:ILE:CD1	1:A:240:ILE:N	2.80	0.43
1:A:400:PHE:HA	1:A:401:PRO:HD3	1.88	0.43
1:A:428:HIS:CD2	1:A:737:LEU:HG	2.52	0.43
1:A:364:LEU:HD23	1:A:372:PHE:CZ	2.53	0.43
1:A:731:ARG:NH1	1:A:731:ARG:HG3	2.33	0.43
1:A:234:TRP:CD1	1:A:239:VAL:HB	2.53	0.43
1:A:640:GLY:C	1:A:641:LEU:CD1	2.82	0.43
1:A:667:LYS:HE3	1:A:667:LYS:O	2.18	0.43
1:A:635:LEU:C	1:A:637:GLY:N	2.71	0.43
1:A:297:ASP:OD1	1:A:297:ASP:N	2.49	0.43
1:A:511:HIS:NE2	1:A:514:GLY:CA	2.82	0.43
1:A:350:TYR:CE2	1:A:644:PRO:HD2	2.53	0.43
1:A:644:PRO:HB3	1:A:645:PRO:HD2	2.01	0.43
1:A:411:PHE:CD1	1:A:412:GLN:N	2.87	0.43
1:A:567:ILE:O	1:A:569:THR:N	2.52	0.43
1:A:672:ILE:CD1	1:A:672:ILE:H	2.31	0.43
1:A:343:GLN:NE2	1:A:651:LYS:HG2	2.33	0.43
1:A:488:GLN:HA	1:A:488:GLN:HE21	1.84	0.43
1:A:555:ASP:CG	1:A:556:ILE:N	2.72	0.43
1:A:308:PHE:CD1	1:A:308:PHE:C	2.92	0.43
1:A:345:PHE:HE2	1:A:649:LEU:HB2	1.83	0.43
1:A:250:PRO:HG2	1:A:252:TYR:CE1	2.54	0.42
1:A:263:SER:O	1:A:265:SER:CB	2.67	0.42
1:A:269:SER:C	1:A:271:ASP:N	2.73	0.42
1:A:564:GLU:OE1	1:A:564:GLU:HA	2.18	0.42
1:A:567:ILE:N	1:A:567:ILE:HD13	2.33	0.42
1:A:663:PHE:CG	1:A:664:ASN:N	2.86	0.42
1:A:289:PHE:HE1	1:A:619:ILE:CA	2.32	0.42
1:A:297:ASP:O	1:A:298:TRP:C	2.58	0.42
1:A:379:TYR:N	1:A:379:TYR:CD2	2.83	0.42
1:A:396:CYS:CA	1:A:398:GLU:OE2	2.67	0.42
1:A:619:ILE:CG2	1:A:620:TRP:CE3	3.02	0.42
1:A:480:LEU:HG	1:A:481:PRO:HD2	2.00	0.42
1:A:508:THR:O	1:A:519:VAL:HG22	2.19	0.42
1:A:525:MET:CE	1:A:525:MET:HA	2.50	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:662:THR:CG2	1:A:663:PHE:H	2.20	0.42
1:A:287:ASN:O	1:A:287:ASN:OD1	2.37	0.42
1:A:318:PHE:HB2	1:A:319:ASN:HD22	1.85	0.42
1:A:306:TRP:NE1	1:A:691:GLU:CB	2.82	0.42
1:A:247:TRP:HB2	1:A:374:ILE:CD1	2.49	0.42
1:A:261:SER:HA	1:A:274:TYR:O	2.20	0.42
1:A:318:PHE:C	1:A:320:ILE:HD12	2.40	0.42
1:A:276:GLY:HA3	1:A:379:TYR:O	2.20	0.42
1:A:678:GLY:HA2	1:A:679:GLN:NE2	2.34	0.42
1:A:318:PHE:HB2	1:A:319:ASN:ND2	2.34	0.42
1:A:714:PHE:O	1:A:722:TYR:HE1	2.03	0.42
1:A:345:PHE:HB3	1:A:402:SER:OG	2.20	0.42
1:A:525:MET:HE3	1:A:572:PRO:HD2	2.02	0.42
1:A:602:VAL:C	1:A:603:LEU:HD12	2.40	0.41
1:A:620:TRP:C	1:A:620:TRP:CD1	2.94	0.41
1:A:317:LEU:O	1:A:317:LEU:HD23	2.19	0.41
1:A:225:SER:OG	1:A:410:ASN:HB3	2.19	0.41
1:A:700:ILE:HD11	1:A:732:TYR:O	2.20	0.41
1:A:445:TYR:CE1	1:A:466:GLN:CG	3.02	0.41
1:A:583:THR:CG2	1:A:595:ALA:HB2	2.51	0.41
1:A:702:TYR:HB2	1:A:732:TYR:CD1	2.56	0.41
1:A:255:HIS:HA	1:A:280:PRO:HB3	2.03	0.41
1:A:352:LEU:HD21	1:A:400:PHE:HE2	1.86	0.41
1:A:551:LYS:HE3	1:A:551:LYS:HB3	1.98	0.41
1:A:561:ILE:HG22	1:A:562:THR:H	1.85	0.41
1:A:249:LEU:HD22	1:A:250:PRO:HD2	2.02	0.41
1:A:332:LYS:NZ	1:A:332:LYS:H	2.18	0.41
1:A:712:VAL:CG1	1:A:713:ASP:N	2.84	0.41
1:A:349:GLU:N	1:A:349:GLU:CD	2.74	0.41
1:A:590:ARG:HH11	1:A:590:ARG:CA	2.33	0.41
1:A:520:ASN:ND2	1:A:521:PRO:CA	2.84	0.41
1:A:655:VAL:HA	1:A:656:PRO:HD2	1.89	0.41
1:A:309:ARG:HB3	1:A:422:PHE:CE2	2.56	0.40
1:A:365:PRO:HA	1:A:366:PRO:HD3	1.90	0.40
1:A:446:TYR:CE1	1:A:474:ASN:HB3	2.56	0.40
1:A:511:HIS:HD2	1:A:512:LEU:N	2.18	0.40
1:A:261:SER:C	1:A:274:TYR:CE2	2.95	0.40
1:A:295:PRO:O	1:A:296:ARG:C	2.60	0.40
1:A:640:GLY:CA	1:A:641:LEU:HD12	2.51	0.40
1:A:682:VAL:HG23	1:A:682:VAL:O	2.21	0.40
1:A:292:HIS:HB2	1:A:293:PHE:CD1	2.56	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:342:ILE:HB	1:A:650:ILE:HD11	2.04	0.40
1:A:668:LEU:HD22	1:A:668:LEU:N	2.36	0.40
1:A:675:TYR:CD1	1:A:675:TYR:C	2.93	0.40
1:A:279:THR:HG22	1:A:377:TYR:O	2.21	0.40
1:A:288:ARG:NH1	1:A:290:HIS:CE1	2.89	0.40
1:A:289:PHE:CE1	1:A:619:ILE:HD12	2.57	0.40
1:A:428:HIS:CD2	1:A:737:LEU:HA	2.56	0.40
1:A:298:TRP:CH2	1:A:615:LEU:CA	3.05	0.40
1:A:451:GLN:C	1:A:461:THR:HG22	2.42	0.40
1:A:527:SER:H	1:A:564:GLU:HB2	1.87	0.40

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles ⓘ

5.3.1 Protein backbone ⓘ

In the following table, the Percentiles column shows the percent Ramachandran outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all EM entries.

The Analysed column shows the number of residues for which the backbone conformation was analysed, and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	515/737 (70%)	463 (90%)	42 (8%)	10 (2%)	9 49

All (10) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	265	SER
1	A	290	HIS
1	A	417	PHE
1	A	632	PRO
1	A	262	ASN
1	A	264	THR
1	A	718	THR
1	A	338	LEU
1	A	368	PRO
1	A	295	PRO

5.3.2 Protein sidechains ⓘ

In the following table, the Percentiles column shows the percent sidechain outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all EM entries.

The Analysed column shows the number of residues for which the sidechain conformation was analysed, and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	458/626 (73%)	386 (84%)	72 (16%)	3 20

All (72) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	225	SER
1	A	227	ASN
1	A	229	HIS
1	A	238	ARG
1	A	249	LEU
1	A	253	ASN
1	A	272	ASN
1	A	274	TYR
1	A	275	PHE
1	A	286	PHE
1	A	290	HIS
1	A	291	CYS
1	A	293	PHE
1	A	296	ARG
1	A	297	ASP
1	A	300	ARG
1	A	309	ARG
1	A	315	PHE
1	A	318	PHE
1	A	319	ASN
1	A	324	GLU
1	A	327	GLN
1	A	332	LYS
1	A	361	GLN
1	A	370	ASP
1	A	372	PHE
1	A	379	TYR
1	A	380	LEU
1	A	395	TYR
1	A	397	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	398	GLU
1	A	409	ASN
1	A	412	GLN
1	A	413	PHE
1	A	418	GLU
1	A	423	HIS
1	A	435	LEU
1	A	436	MET
1	A	452	THR
1	A	470	ASN
1	A	485	TYR
1	A	486	ARG
1	A	496	ASP
1	A	502	TYR
1	A	515	ARG
1	A	516	ASP
1	A	520	ASN
1	A	531	ASP
1	A	535	PHE
1	A	585	LEU
1	A	586	GLN
1	A	587	ARG
1	A	590	ARG
1	A	598	ASN
1	A	599	THR
1	A	603	LEU
1	A	619	ILE
1	A	641	LEU
1	A	648	ILE
1	A	667	LYS
1	A	671	PHE
1	A	686	TRP
1	A	688	LEU
1	A	690	LYS
1	A	691	GLU
1	A	692	ASN
1	A	695	ARG
1	A	697	ASN
1	A	707	TYR
1	A	710	THR
1	A	716	VAL
1	A	735	ARG

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (25) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	272	ASN
1	A	292	HIS
1	A	299	GLN
1	A	305	ASN
1	A	319	ASN
1	A	327	GLN
1	A	337	ASN
1	A	343	GLN
1	A	351	GLN
1	A	376	GLN
1	A	384	ASN
1	A	387	GLN
1	A	409	ASN
1	A	428	HIS
1	A	475	GLN
1	A	487	GLN
1	A	488	GLN
1	A	498	ASN
1	A	553	ASN
1	A	609	GLN
1	A	647	GLN
1	A	652	ASN
1	A	664	ASN
1	A	689	GLN
1	A	692	ASN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

5.6 Ligand geometry

There are no ligands in this entry.

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.