



# wwPDB X-ray Structure Validation Summary Report ⓘ

Feb 20, 2018 – 10:52 pm GMT

PDB ID : 1HC1  
Title : CRYSTAL STRUCTURE OF HEXAMERIC HAEMOCYANIN FROM PAN-  
ULIRUS INTERRUPTUS REFINED AT 3.2 ANGSTROMS RESOLUTION  
Authors : Volbeda, A.; Hol, W.G.J.  
Deposited on : 1991-05-15  
Resolution : 3.20 Å(reported)

This is a wwPDB X-ray Structure Validation Summary Report for a publicly released PDB entry.

We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto:validation@mail.wwpdb.org)

A user guide is available at

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/XrayValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

---

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

MolProbity : 4.02b-467  
Xtriage (Phenix) : **NOT EXECUTED**  
EDS : **NOT EXECUTED**  
Percentile statistics : 20171227.v01 (using entries in the PDB archive December 27th 2017)  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : trunk30686

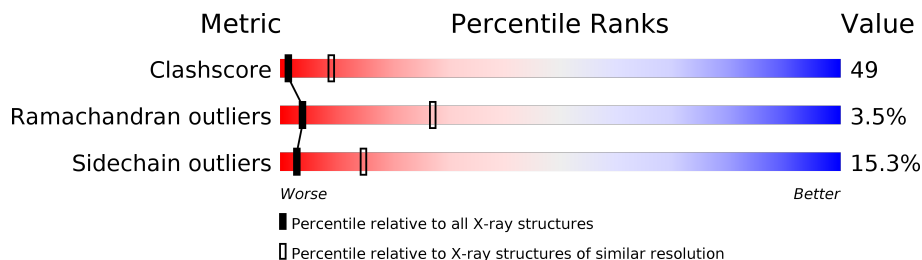
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*X-RAY DIFFRACTION*

The reported resolution of this entry is 3.20 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	122078	1092 (3.20-3.20)
Ramachandran outliers	120005	1075 (3.20-3.20)
Sidechain outliers	119972	1074 (3.20-3.20)

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  $\geq 3$ , 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  $\leq 5\%$ . The upper red bar (where present) indicates the fraction of residues that have poor fit to the electron density. The numeric value is given above the bar.

Note EDS was not executed.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	657	
1	B	657	
1	C	657	
1	D	657	
1	E	657	
1	F	657	

## 2 Entry composition

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 32166 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

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 ARTHROPODAN HEMOCYANIN.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	634	Total	C	N	O	S	0	0	0
			5173	3283	892	977	21			
1	B	634	Total	C	N	O	S	0	0	0
			5173	3283	892	977	21			
1	C	634	Total	C	N	O	S	0	0	0
			5173	3283	892	977	21			
1	D	634	Total	C	N	O	S	0	0	0
			5173	3283	892	977	21			
1	E	634	Total	C	N	O	S	0	0	0
			5173	3283	892	977	21			
1	F	634	Total	C	N	O	S	0	0	0
			5173	3283	892	977	21			

There are 24 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	32	ASP	GLU	CONFLICT	UNP P04254
A	163	PRO	GLN	CONFLICT	UNP P04254
A	458	ASN	LYS	CONFLICT	UNP P04254
A	514	SER	LYS	CONFLICT	UNP P04254
B	32	ASP	GLU	CONFLICT	UNP P04254
B	163	PRO	GLN	CONFLICT	UNP P04254
B	458	ASN	LYS	CONFLICT	UNP P04254
B	514	SER	LYS	CONFLICT	UNP P04254
C	32	ASP	GLU	CONFLICT	UNP P04254
C	163	PRO	GLN	CONFLICT	UNP P04254
C	458	ASN	LYS	CONFLICT	UNP P04254
C	514	SER	LYS	CONFLICT	UNP P04254
D	32	ASP	GLU	CONFLICT	UNP P04254
D	163	PRO	GLN	CONFLICT	UNP P04254
D	458	ASN	LYS	CONFLICT	UNP P04254
D	514	SER	LYS	CONFLICT	UNP P04254
E	32	ASP	GLU	CONFLICT	UNP P04254

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
E	163	PRO	GLN	CONFLICT	UNP P04254
E	458	ASN	LYS	CONFLICT	UNP P04254
E	514	SER	LYS	CONFLICT	UNP P04254
F	32	ASP	GLU	CONFLICT	UNP P04254
F	163	PRO	GLN	CONFLICT	UNP P04254
F	458	ASN	LYS	CONFLICT	UNP P04254
F	514	SER	LYS	CONFLICT	UNP P04254

- Molecule 2 is COPPER (II) ION (three-letter code: CU) (formula: Cu).

Mol	Chain	Residues	Atoms	ZeroOcc	AltConf
2	D	2	Total Cu 2 2	0	0
2	E	2	Total Cu 2 2	0	0
2	B	2	Total Cu 2 2	0	0
2	C	2	Total Cu 2 2	0	0
2	A	2	Total Cu 2 2	0	0
2	F	2	Total Cu 2 2	0	0

- Molecule 3 is water.

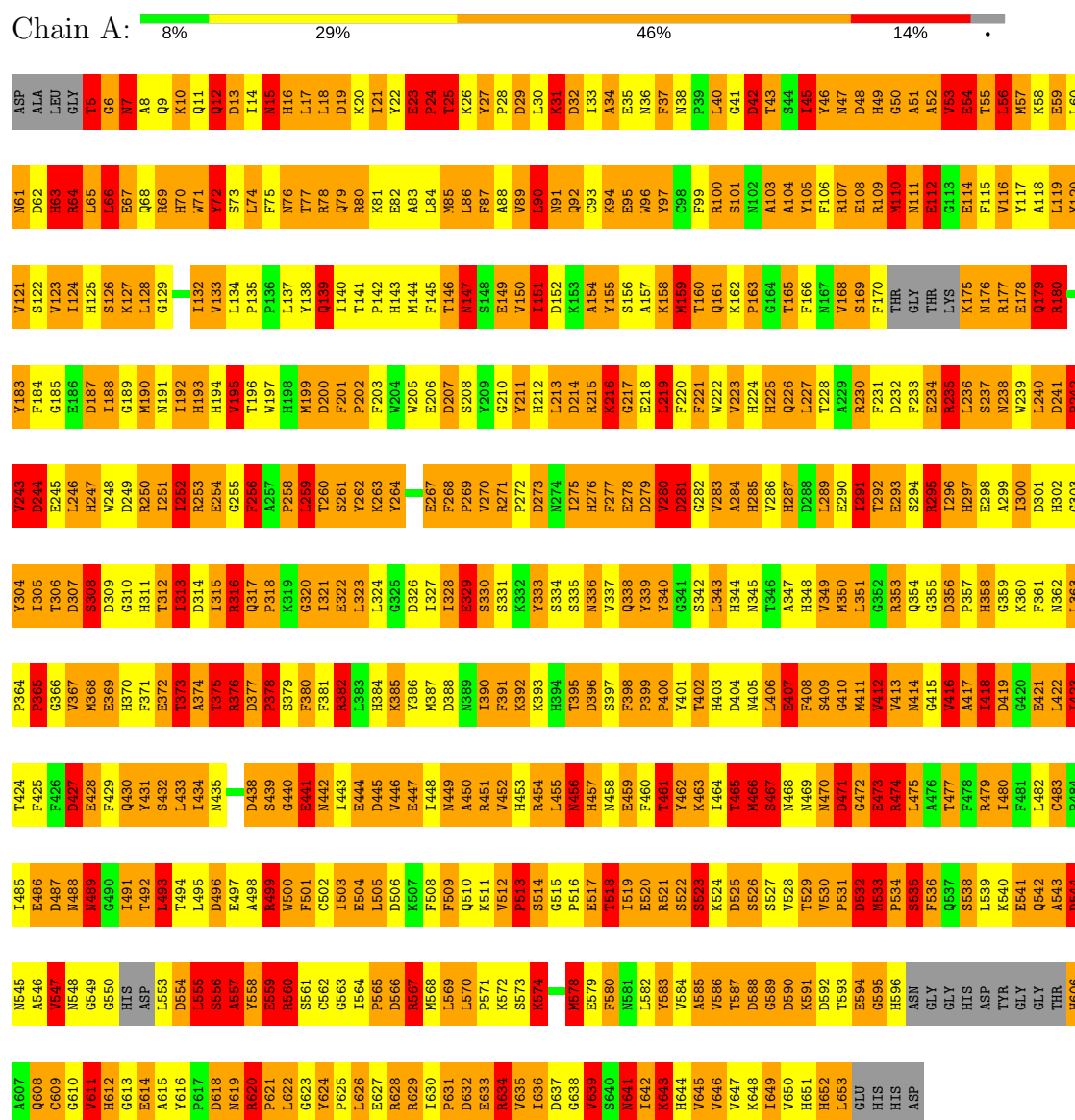
Mol	Chain	Residues	Atoms	ZeroOcc	AltConf
3	A	186	Total O 186 186	0	0
3	B	186	Total O 186 186	0	0
3	C	186	Total O 186 186	0	0
3	D	186	Total O 186 186	0	0
3	E	186	Total O 186 186	0	0
3	F	186	Total O 186 186	0	0

### 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 the various outlier classes 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 was not executed.

#### • Molecule 1: ARTHROPODAN HEMOCYANIN



#### • Molecule 1: ARTHROPODAN HEMOCYANIN

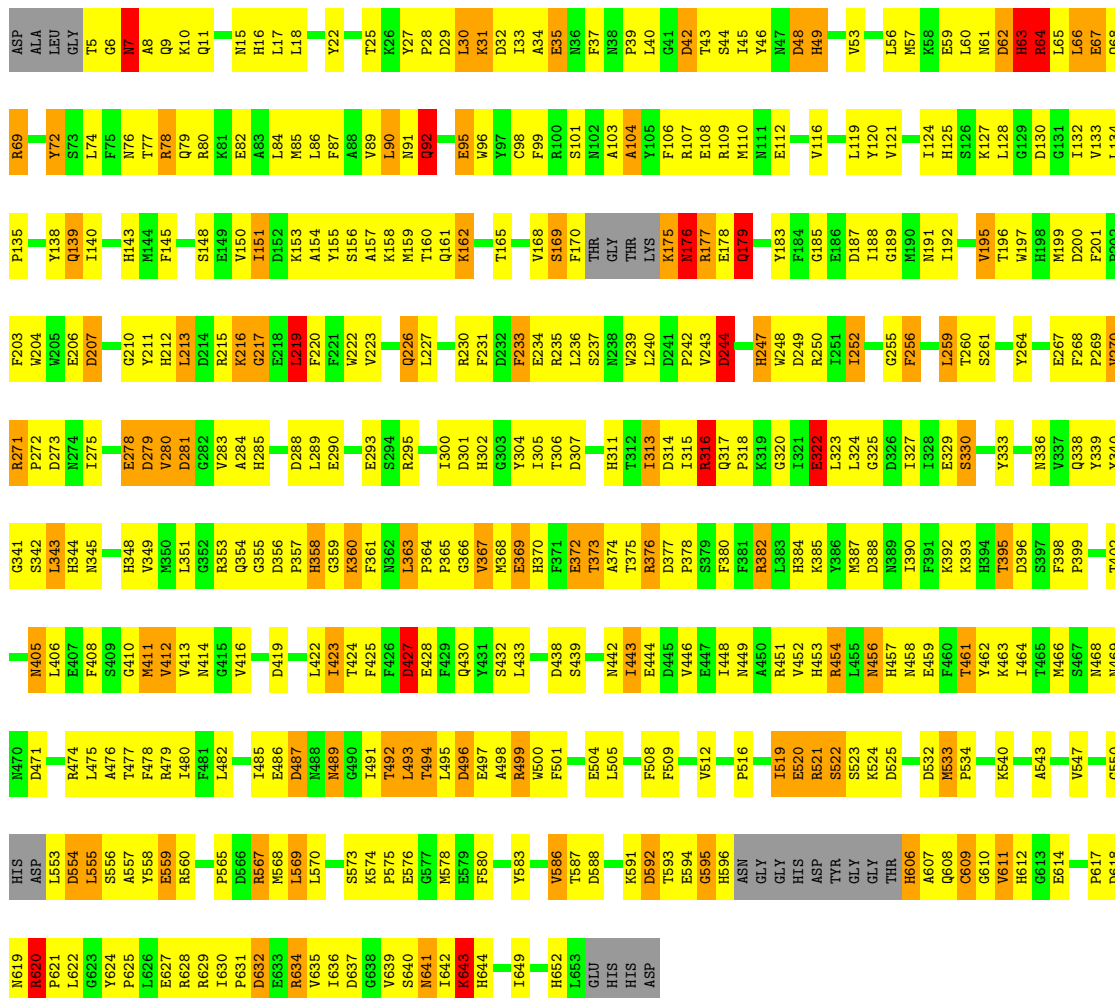
Chain B:  7% 32% 42% 16%

ASP	ALA	LEU	GLY	T5	G6	H7	A8	Q9	Q11	Q12	Q13	I14	M15	H16	L17	L18	L19	D20	K21	E22	E23	E24	E25	E26	E27	E28	E29	E30	E31	E32	E33	E34	E35	E36	E37	E38	E39	E40	E41	E42	E43	E44	E45	E46	E47	E48	E49	E50	E51	E52	E53	E54	E55	E56	E57	E58	E59	E60	E61	E62	E63	E64	E65	E66	E67	E68	E69	E70	E71	E72	E73	E74	E75	E76	E77	E78	E79	E80	E81	E82	E83	E84	E85	E86	E87	E88	E89	E90	E91	E92	E93	E94	E95	E96	E97	E98	E99	E100	E101	E102	E103	E104	E105	E106	E107	E108	E109	E110	E111	E112	E113	E114	E115	E116	E117	E118	E119	E120	E121	E122	E123	E124	E125	E126	E127	E128	E129	E130	E131	E132	E133	E134	E135	E136	E137	E138	E139	E140	E141	E142	E143	E144	E145	E146	E147	E148	E149	E150	E151	E152	E153	E154	E155	E156	E157	E158	E159	E160	E161	E162	E163	E164	E165	E166	E167	E168	E169	E170	E171	E172	E173	E174	E175	E176	E177	E178	E179	E180	E181	E182	E183	E184	E185	E186	E187	E188	E189	E190	E191	E192	E193	E194	E195	E196	E197	E198	E199	E200	E201	E202	E203	E204	E205	E206	E207	E208	E209	E210	E211	E212	E213	E214	E215	E216	E217	E218	E219	E220	E221	E222	E223	E224	E225	E226	E227	E228	E229	E230	E231	E232	E233	E234	E235	E236	E237	E238	E239	E240	E241	E242	E243	E244	E245	E246	E247	E248	E249	E250	E251	E252	E253	E254	E255	E256	E257	E258	E259	E260	E261	E262	E263	E264	E265	E266	E267	E268	E269	E270	E271	E272	E273	E274	E275	E276	E277	E278	E279	E280	E281	E282	E283	E284	E285	E286	E287	E288	E289	E290	E291	E292	E293	E294	E295	E296	E297	E298	E299	E300	E301	E302	E303	E304	E305	E306	E307	E308	E309	E310	E311	E312	E313	E314	E315	E316	E317	E318	E319	E320	E321	E322	E323	E324	E325	E326	E327	E328	E329	E330	E331	E332	E333	E334	E335	E336	E337	E338	E339	E340	E341	E342	E343	E344	E345	E346	E347	E348	E349	E350	E351	E352	E353	E354	E355	E356	E357	E358	E359	E360	E361	E362	E363	E364	E365	E366	E367	E368	E369	E370	E371	E372	E373	E374	E375	E376	E377	E378	E379	E380	E381	E382	E383	E384	E385	E386	E387	E388	E389	E390	E391	E392	E393	E394	E395	E396	E397	E398	E399	E400	E401	E402	E403	E404	E405	E406	E407	E408	E409	E410	E411	E412	E413	E414	E415	E416	E417	E418	E419	E420	E421	E422	E423	E424	E425	E426	E427	E428	E429	E430	E431	E432	E433	E434	E435	E436	E437	E438	E439	E440	E441	E442	E443	E444	E445	E446	E447	E448	E449	E450	E451	E452	E453	E454	E455	E456	E457	E458	E459	E460	E461	E462	E463	E464	E465	E466	E467	E468	E469	E470	E471	E472	E473	E474	E475	E476	E477	E478	E479	E480	E481	E482	E483	E484	E485	E486	E487	E488	E489	E490	E491	E492	E493	E494	E495	E496	E497	E498	E499	E500	E501	E502	E503	E504	E505	E506	E507	E508	E509	E510	E511	E512	E513	E514	E515	E516	E517	E518	E519	E520	E521	E522	E523	E524	E525	E526	E527	E528	E529	E530	E531	E532	E533	E534	E535	E536	E537	E538	E539	E540	E541	E542	E543	E544	E545	E546	E547	E548	E549	E550	E551	E552	E553	E554	E555	E556	E557	E558	E559	E560	E561	E562	E563	E564	E565	E566	E567	E568	E569	E570	E571	E572	E573	E574	E575	E576	E577	E578	E579	E580	E581	E582	E583	E584	E585	E586	E587	E588	E589	E590	E591	E592	E593	E594	E595	E596	E597	E598	E599	E600	E601	E602	E603	E604	E605	E606	E607	E608	E609	E610	E611	E612	E613	E614	E615	E616	E617	E618	E619	E620	E621	E622	E623	E624	E625	E626	E627	E628	E629	E630	E631	E632	E633	E634	E635	E636	E637	E638	E639	E640	E641	E642	E643	E644	E645	E646	E647	E648	E649	E650	E651	E652	E653	E654	E655	E656	E657	E658	E659	E660	E661	E662	E663	E664	E665	E666	E667	E668	E669	E670	E671	E672	E673	E674	E675	E676	E677	E678	E679	E680	E681	E682	E683	E684	E685	E686	E687	E688	E689	E690	E691	E692	E693	E694	E695	E696	E697	E698	E699	E700	E701	E702	E703	E704	E705	E706	E707	E708	E709	E710	E711	E712	E713	E714	E715	E716	E717	E718	E719	E720	E721	E722	E723	E724	E725	E726	E727	E728	E729	E730	E731	E732	E733	E734	E735	E736	E737	E738	E739	E740	E741	E742	E743	E744	E745	E746	E747	E748	E749	E750	E751	E752	E753	E754	E755	E756	E757	E758	E759	E760	E761	E762	E763	E764	E765	E766	E767	E768	E769	E770	E771	E772	E773	E774	E775	E776	E777	E778	E779	E780	E781	E782	E783	E784	E785	E786	E787	E788	E789	E790	E791	E792	E793	E794	E795	E796	E797	E798	E799	E800	E801	E802	E803	E804	E805	E806	E807	E808	E809	E810	E811	E812	E813	E814	E815	E816	E817	E818	E819	E820	E821	E822	E823	E824	E825	E826	E827	E828	E829	E830	E831	E832	E833	E834	E835	E836	E837	E838	E839	E840	E841	E842	E843	E844	E845	E846	E847	E848	E849	E850	E851	E852	E853	E854	E855	E856	E857	E858	E859	E860	E861	E862	E863	E864	E865	E866	E867	E868	E869	E870	E871	E872	E873	E874	E875	E876	E877	E878	E879	E880	E881	E882	E883	E884	E885	E886	E887	E888	E889	E890	E891	E892	E893	E894	E895	E896	E897	E898	E899	E900	E901	E902	E903	E904	E905	E906	E907	E908	E909	E910	E911	E912	E913	E914	E915	E916	E917	E918	E919	E920	E921	E922	E923	E924	E925	E926	E927	E928	E929	E930	E931	E932	E933	E934	E935	E936	E937	E938	E939	E940	E941	E942	E943	E944	E945	E946	E947	E948	E949	E950	E951	E952	E953	E954	E955	E956	E957	E958	E959	E960	E961	E962	E963	E964	E965	E966	E967	E968	E969	E970	E971	E972	E973	E974	E975	E976	E977	E978	E979	E980	E981	E982	E983	E984	E985	E986	E987	E988	E989	E990	E991	E992	E993	E994	E995	E996	E997	E998	E999	E1000	E1001	E1002	E1003	E1004	E1005	E1006	E1007	E1008	E1009	E1010	E1011	E1012	E1013	E1014	E1015	E1016	E1017	E1018	E1019	E1020	E1021	E1022	E1023	E1024	E1025	E1026	E1027	E1028	E1029	E1030	E1031	E1032	E1033	E1034	E1035	E1036	E1037	E1038	E1039	E1040	E1041	E1042	E1043	E1044	E1045	E1046	E1047	E1048	E1049	E1050	E1051	E1052	E1053	E1054	E1055	E1056	E1057	E1058	E1059	E1060	E1061	E1062	E1063	E1064	E1065	E1066	E1067	E1068	E1069	E1070	E1071	E1072	E1073	E1074	E1075	E1076	E1077	E1078	E1079	E1080	E1081	E1082	E1083	E1084	E1085	E1086	E1087	E1088	E1089	E1090	E1091	E1092	E1093	E1094	E1095	E1096	E1097	E1098	E1099	E1100	E1101	E1102	E1103	E1104	E1105	E1106	E1107	E1108	E1109	E1110	E1111	E1112	E1113	E1114	E1115	E1116	E1117	E1118	E1119	E1120	E1121	E1122	E1123	E1124	E1125	E1126	E1127	E1128	E1129	E1130	E1131	E1132	E1133	E1134	E1135	E1136	E1137	E1138	E1139	E1140	E1141	E1142	E1143	E1144	E1145	E1146	E1147	E1148	E1149	E1150	E1151	E1152	E1153	E1154	E1155	E1156	E1157	E1158	E1159	E1160	E1161	E1162	E1163	E1164	E1165	E1166	E1167	E1168	E1169	E1170	E1171	E1172	E1173	E1174	E1175	E1176	E1177	E1178	E1179	E1180	E1181	E1182	E1183	E1184	E1185	E1186	E1187	E1188	E1189	E1190	E1191	E1192	E1193	E1194	E1195	E1196	E1197	E1198	E1199	E1200	E1201	E1202	E1203	E1204	E1205	E1206	E1207	E1208	E1209	E1210	E1211	E1212	E1213	E1214	E1215	E1216	E1217	E1218	E1219	E1220	E1221	E1222	E1223	E1224	E1225	E1226	E1227	E1228	E1229	E1230	E1231	E1232	E1233	E1234	E1235	E1236	E1237	E1238	E1239	E1240	E1241	E1242	E1243	E1244	E1245	E1246	E1247	E1248	E1249	E1250	E1251	E1252	E1253	E1254	E1255	E1256	E1257	E1258	E1259	E1260	E1261	E1262	E1263	E1264	E1265	E1266	E1267	E1268	E1269	E1270	E1271	E1272	E1273	E1274	E1275	E1276	E1277	E1278	E1279	E1280	E1281	E1282	E1283	E1284	E1285	E1286	E1287	E1288	E1289	E1290	E1291	E1292	E1293	E1294	E1295	E1296	E1297	E1298	E1299	E1300	E1301	E1302	E1303	E1304	E1305	E1306	E1307	E1308	E1309	E1310	E1311	E1312	E1313	E1314	E1315	E1316	E1317	E1318	E1319	E1320	E1321	E1322	E1323	E1324	E1325	E1326	E1327	E1328	E1329	E1330	E1331	E1332	E1333	E1334	E1335	E1336	E1337	E1338	E1339	E1340	E1341	E1342	E1343	E1344	E1345	E1346	E1347	E1348	E1349	E1350	E1351	E1352	E1353	E1354	E1355	E1356	E1357	E1358	E1359	E1360	E1361	E1362	E1363	E1364	E1365	E1366	E1367	E1368	E1369	E1370	E1371	E1372	E1373	E1374	E1375	E1376	E1377	E1378	E1379	E1380	E1381	E1382	E1383	E1384	E1385	E1386	E1387	E1388	E1389	E1390	E1391	E1392	E1393	E1394	E1395	E1396	E1397	E1398	E1399	E1400	E1401	E1402	E1403	E1404	E1405	E1406	E1407	E1408	E1409	E1410	E1411	E1412	E1413	E1414	E1415	E1416	E1417	E1418	E1419	E1420	E1421	E1422	E1423	E1424	E1425	E1426	E1427	E1428	E1429	E1430	E1431	E1432	E1433	E1434	E1435	E1436	E1437	E1438	E1439	E1440	E1441	E1442	E1443	E1444	E1445	E1446	E1447	E1448	E1449	E1450	E1451	E1452	E1453	E1454	E1455	E1456	E1457	E1458	E1459	E1460	E1461	E1462	E1463	E1464	E1465	E1466	E1467	E1468	E1469	E1470	E1471	E1472	E1
-----	-----	-----	-----	----	----	----	----	----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	----



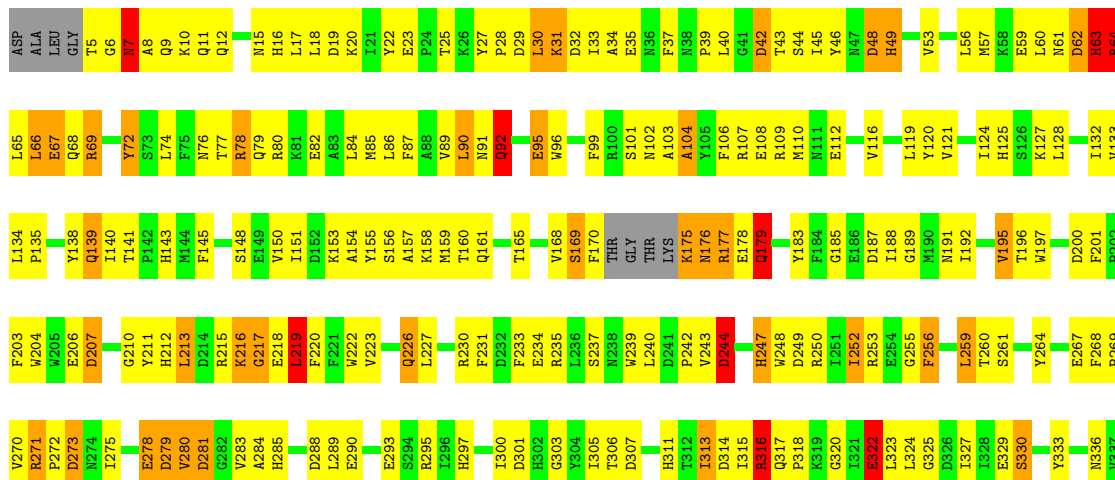
• Molecule 1: ARTHROPODAN HEMOCYANIN

Chain E: 



• Molecule 1: ARTHROPODAN HEMOCYANIN

Chain F: 







## 4 Data and refinement statistics

Xtriage (Phenix) and EDS were not executed - this section is therefore incomplete.

Property	Value	Source
Space group	P 1 21 1	Depositor
Cell constants a, b, c, $\alpha$ , $\beta$ , $\gamma$	119.80Å 193.10Å 122.20Å 90.00° 118.10° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	8.00 – 3.20	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	(Not available) (8.00-3.20)	Depositor
$R_{merge}$	(Not available)	Depositor
$R_{sym}$	(Not available)	Depositor
Refinement program	PROLSQ	Depositor
R, $R_{free}$	0.201 , (Not available)	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	32166	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å <sup>2</sup> )	17.0	wwPDB-VP

## 5 Model quality [i](#)

### 5.1 Standard geometry [i](#)

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section:  
CU

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	1.41	11/5316 (0.2%)	4.13	1053/7205 (14.6%)
1	B	1.40	14/5316 (0.3%)	3.74	1016/7205 (14.1%)
1	C	0.75	0/5316	1.64	87/7205 (1.2%)
1	D	0.77	1/5316 (0.0%)	1.66	94/7205 (1.3%)
1	E	0.76	2/5316 (0.0%)	1.64	87/7205 (1.2%)
1	F	0.75	0/5316	1.65	94/7205 (1.3%)
All	All	1.02	28/31896 (0.1%)	2.64	2431/43230 (5.6%)

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	1
1	B	0	2
All	All	0	3

The worst 5 of 28 bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	E	550	GLY	C-O	7.84	1.36	1.23
1	B	208	SER	CB-OG	7.79	1.52	1.42
1	A	441	GLU	CB-CG	7.42	1.66	1.52
1	A	526	SER	CB-OG	6.86	1.51	1.42
1	B	267	GLU	CD-OE2	-6.23	1.18	1.25

The worst 5 of 2431 bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	64	ARG	NE-CZ-NH2	89.27	164.93	120.30
1	A	207	ASP	CB-CG-OD1	43.98	157.88	118.30
1	B	271	ARG	NE-CZ-NH1	43.24	141.92	120.30
1	A	273	ASP	CB-CG-OD1	40.24	154.52	118.30
1	B	273	ASP	CB-CG-OD1	39.23	153.61	118.30

There are no chirality outliers.

All (3) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	295	ARG	Sidechain
1	B	177	ARG	Sidechain
1	B	521	ARG	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	5173	0	4880	687	0
1	B	5173	0	4883	651	1
1	C	5173	0	4888	416	3
1	D	5173	0	4888	472	1
1	E	5173	0	4888	428	0
1	F	5173	0	4888	416	1
2	A	2	0	0	0	0
2	B	2	0	0	0	0
2	C	2	0	0	0	0
2	D	2	0	0	0	0
2	E	2	0	0	0	0
2	F	2	0	0	0	0
3	A	186	0	0	39	0
3	B	186	0	0	15	0
3	C	186	0	0	11	0
3	D	186	0	0	11	0
3	E	186	0	0	10	0
3	F	186	0	0	9	0
All	All	32166	0	29315	2986	3

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 49.

The worst 5 of 2986 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:161:GLN:OE1	1:B:443:ILE:HD13	1.28	1.29
1:A:422:LEU:CD2	1:A:570:LEU:HD21	1.66	1.23
1:A:316:ARG:HD3	3:A:829:HOH:O	1.41	1.19
1:A:165:THR:CG2	1:A:449:ASN:HB2	1.73	1.17
1:B:456:ASN:HD22	1:B:457:HIS:N	1.42	1.17

All (3) symmetry-related close contacts are listed below. The label for Atom-2 includes the symmetry operator and encoded unit-cell translations to be applied.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:B:309:ASP:OD1	1:C:49:HIS:CD2[2_647]	1.85	0.35
1:C:594:GLU:OE1	1:F:471:ASP:CB[2_657]	2.13	0.07
1:C:474:ARG:NH2	1:D:41:GLY:O[2_656]	2.17	0.03

## 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	626/657 (95%)	501 (80%)	97 (16%)	28 (4%)	3	21
1	B	626/657 (95%)	506 (81%)	89 (14%)	31 (5%)	2	18
1	C	626/657 (95%)	517 (83%)	95 (15%)	14 (2%)	7	39
1	D	626/657 (95%)	516 (82%)	91 (14%)	19 (3%)	5	31
1	E	626/657 (95%)	512 (82%)	95 (15%)	19 (3%)	5	31
1	F	626/657 (95%)	503 (80%)	102 (16%)	21 (3%)	4	27
All	All	3756/3942 (95%)	3055 (81%)	569 (15%)	132 (4%)	4	27

5 of 132 Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	42	ASP
1	A	147	ASN
1	A	176	ASN
1	A	441	GLU
1	A	471	ASP

### 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	564/580 (97%)	438 (78%)	126 (22%)	1	4
1	B	564/580 (97%)	450 (80%)	114 (20%)	1	7
1	C	564/580 (97%)	494 (88%)	70 (12%)	5	23
1	D	564/580 (97%)	489 (87%)	75 (13%)	4	20
1	E	564/580 (97%)	498 (88%)	66 (12%)	6	26
1	F	564/580 (97%)	498 (88%)	66 (12%)	6	26
All	All	3384/3480 (97%)	2867 (85%)	517 (15%)	3	15

5 of 517 residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	B	596	HIS
1	C	461	THR
1	F	313	ILE
1	C	23	GLU
1	C	279	ASP

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. 5 of 158 such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	C	405	ASN
1	D	147	ASN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	F	338	GLN
1	C	435	ASN
1	D	11	GLN

### 5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules 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 ⓘ

There are no carbohydrates in this entry.

### 5.6 Ligand geometry ⓘ

Of 12 ligands modelled in this entry, 12 are monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

### 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 [i](#)

### 6.1 Protein, DNA and RNA chains [i](#)

EDS was not executed - this section is therefore empty.

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

EDS was not executed - this section is therefore empty.

### 6.3 Carbohydrates [i](#)

EDS was not executed - this section is therefore empty.

### 6.4 Ligands [i](#)

EDS was not executed - this section is therefore empty.

### 6.5 Other polymers [i](#)

EDS was not executed - this section is therefore empty.