



wwPDB X-ray Structure Validation Summary Report ⓘ

Mar 8, 2026 – 06:38 AM UTC

PDB ID : 1F51 / pdb_00001f51
Title : A TRANSIENT INTERACTION BETWEEN TWO PHOSPHORELAY PROTEINS TRAPPED IN A CRYSTAL LATTICE REVEALS THE MECHANISM OF MOLECULAR RECOGNITION AND PHOSPHOTRANSFER IN SINGAL TRANSDUCTION
Authors : Zapf, J.; Sen, U.; Madhusudan, M.; Hoch, J.A.; Varughese, K.I.
Deposited on : 2000-06-11
Resolution : 3.00 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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

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

MolProbity : 4-5-2 with Phenix2.0
Xtriage (Phenix) : **NOT EXECUTED**
EDS : **NOT EXECUTED**
Percentile statistics : 20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.49

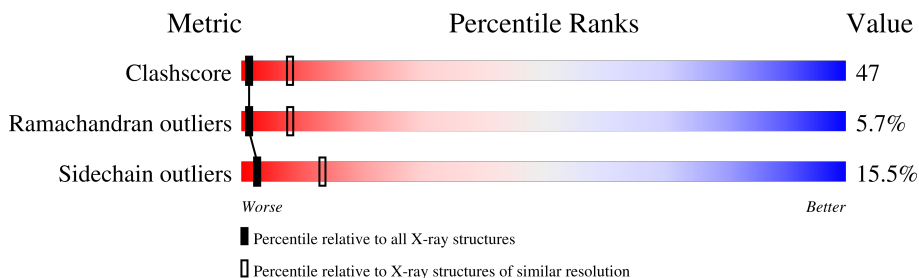
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.00 Å.

Percentile scores (ranging between 0-100) for global validation metrics of the entry are shown in the following graphic. The table shows the number of entries on which the scores are based.



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
Clashscore	190562	2977 (3.00-3.00)
Ramachandran outliers	187476	2877 (3.00-3.00)
Sidechain outliers	187428	2880 (3.00-3.00)

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the electron density. The red, orange, yellow and green segments of the lower bar indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria respectively. 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 $\leq 5\%$

Note EDS was not executed.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	182	
1	B	182	
1	C	182	
1	D	182	
2	E	119	
2	F	119	
2	G	119	
2	H	119	

2 Entry composition

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 9751 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 SPORULATION INITIATION PHOSPHOTRANSFERASE B.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	181	Total	C	N	O	S	0	0	0
			1489	949	250	283	7			
1	B	182	Total	C	N	O	S	6	0	0
			1504	959	253	285	7			
1	C	181	Total	C	N	O	S	0	0	0
			1481	945	249	280	7			
1	D	182	Total	C	N	O	S	6	0	0
			1497	955	252	283	7			

- Molecule 2 is a protein called SPORULATION INITIATION PHOSPHOTRANSFERASE F.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
2	E	119	Total	C	N	O	S	0	0	0
			940	603	155	177	5			
2	F	119	Total	C	N	O	S	0	0	0
			950	609	156	180	5			
2	G	119	Total	C	N	O	S	0	0	0
			947	608	155	179	5			
2	H	119	Total	C	N	O	S	0	0	0
			940	603	155	177	5			

- Molecule 3 is MAGNESIUM ION (CCD ID: MG) (formula: Mg).

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	E	1	Total	Mg	0	0
			1	1		
3	F	1	Total	Mg	0	0
			1	1		
3	H	1	Total	Mg	0	0
			1	1		

3 Residue-property plots

These plots are drawn for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide 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. 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. 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.

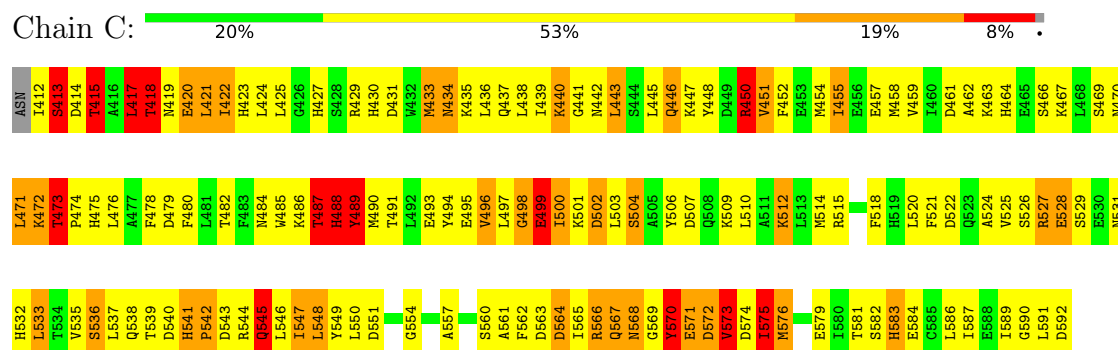
• Molecule 1: SPORULATION INITIATION PHOSPHOTRANSFERASE B



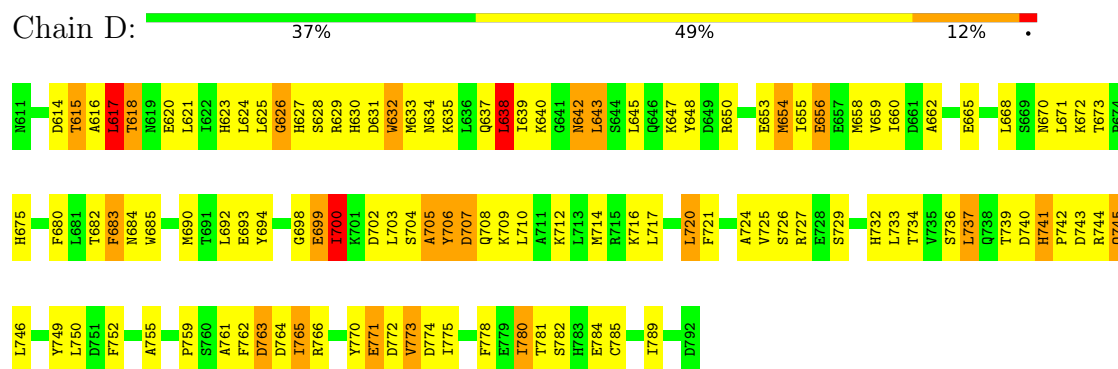
• Molecule 1: SPORULATION INITIATION PHOSPHOTRANSFERASE B



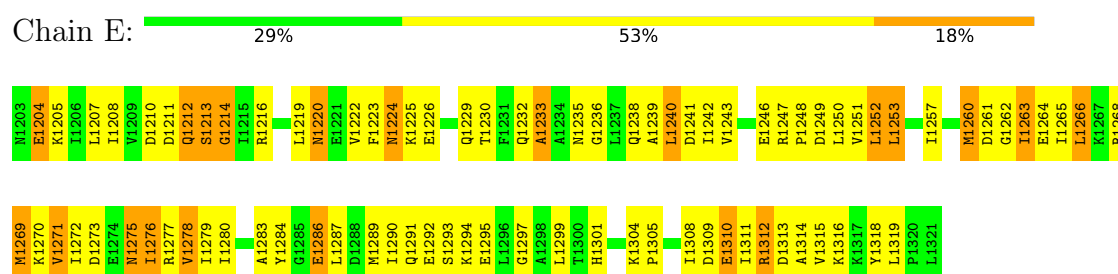
• Molecule 1: SPORULATION INITIATION PHOSPHOTRANSFERASE B



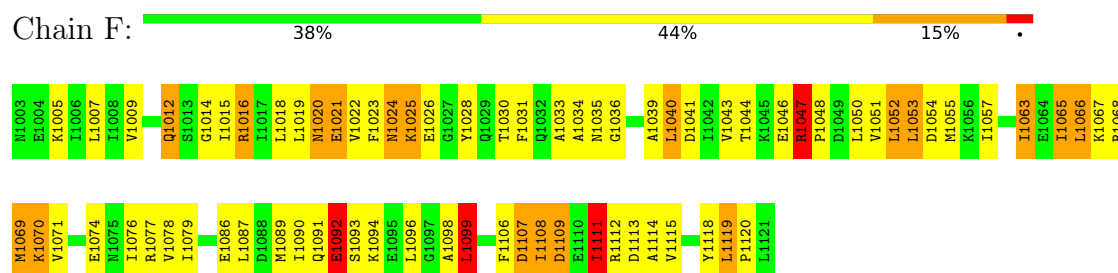
● Molecule 1: SPORULATION INITIATION PHOSPHOTRANSFERASE B



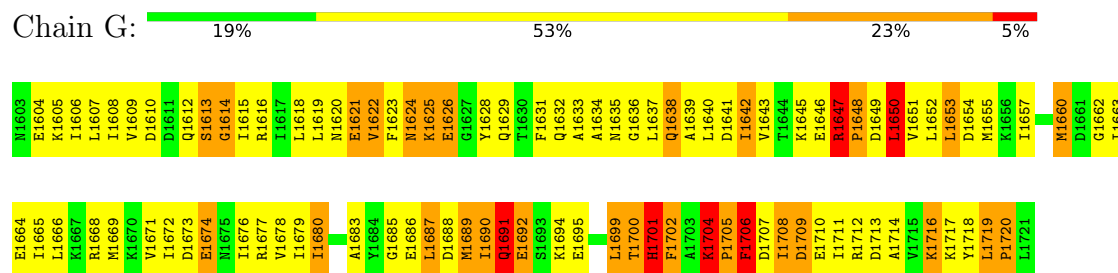
● Molecule 2: SPORULATION INITIATION PHOSPHOTRANSFERASE F



● Molecule 2: SPORULATION INITIATION PHOSPHOTRANSFERASE F



● Molecule 2: SPORULATION INITIATION PHOSPHOTRANSFERASE F



● Molecule 2: SPORULATION INITIATION PHOSPHOTRANSFERASE F



E1464	E1465	E1466	E1467	E1468	E1469	E1470	E1471	E1472	E1473	E1474	E1475	E1476	E1477	E1478	E1479	E1480	E1481	E1482	E1483	E1484	E1485	E1486	E1487	E1488	E1489	E1490	E1491	E1492	E1493	E1494	E1495	E1496	E1497	E1498	E1499	E1500	E1501	E1502	E1503	E1504	E1505	E1506	E1507	E1508	E1509	E1510	E1511	E1512	E1513	E1514	E1515	E1516	E1517	E1518	E1519	E1520	E1521	E1522	E1523	E1524	E1525	E1526	E1527	E1528	E1529	E1530	E1531	E1532	E1533	E1534	E1535	E1536	E1537	E1538	E1539	E1540	E1541	E1542	E1543	E1544	E1545	E1546	E1547	E1548	E1549	E1550	E1551	E1552	E1553	E1554	E1555	E1556	E1557	E1558	E1559	E1560	E1561	E1562	E1563	E1564	E1565	E1566	E1567	E1568	E1569	E1570	E1571	E1572	E1573	E1574	E1575	E1576	E1577	E1578	E1579	E1580	E1581	E1582	E1583	E1584	E1585	E1586	E1587	E1588	E1589	E1590	E1591	E1592	E1593	E1594	E1595	E1596	E1597	E1598	E1599	E1600	E1601	E1602	E1603	E1604	E1605	E1606	E1607	E1608	E1609	E1610	E1611	E1612	E1613	E1614	E1615	E1616	E1617	E1618	E1619	E1620	E1621	E1622	E1623	E1624	E1625	E1626	E1627	E1628	E1629	E1630	E1631	E1632	E1633	E1634	E1635	E1636	E1637	E1638	E1639	E1640	E1641	E1642	E1643	E1644	E1645	E1646	E1647	E1648	E1649	E1650	E1651	E1652	E1653	E1654	E1655	E1656	E1657	E1658	E1659	E1660	E1661	E1662	E1663	E1664	E1665	E1666	E1667	E1668	E1669	E1670	E1671	E1672	E1673	E1674	E1675	E1676	E1677	E1678	E1679	E1680	E1681	E1682	E1683	E1684	E1685	E1686	E1687	E1688	E1689	E1690	E1691	E1692	E1693	E1694	E1695	E1696	E1697	E1698	E1699	E1700	E1701	E1702	E1703	E1704	E1705	E1706	E1707	E1708	E1709	E1710	E1711	E1712	E1713	E1714	E1715	E1716	E1717	E1718	E1719	E1720	E1721	E1722	E1723	E1724	E1725	E1726	E1727	E1728	E1729	E1730	E1731	E1732	E1733	E1734	E1735	E1736	E1737	E1738	E1739	E1740	E1741	E1742	E1743	E1744	E1745	E1746	E1747	E1748	E1749	E1750	E1751	E1752	E1753	E1754	E1755	E1756	E1757	E1758	E1759	E1760	E1761	E1762	E1763	E1764	E1765	E1766	E1767	E1768	E1769	E1770	E1771	E1772	E1773	E1774	E1775	E1776	E1777	E1778	E1779	E1780	E1781	E1782	E1783	E1784	E1785	E1786	E1787	E1788	E1789	E1790	E1791	E1792	E1793	E1794	E1795	E1796	E1797	E1798	E1799	E1800	E1801	E1802	E1803	E1804	E1805	E1806	E1807	E1808	E1809	E1810	E1811	E1812	E1813	E1814	E1815	E1816	E1817	E1818	E1819	E1820	E1821	E1822	E1823	E1824	E1825	E1826	E1827	E1828	E1829	E1830	E1831	E1832	E1833	E1834	E1835	E1836	E1837	E1838	E1839	E1840	E1841	E1842	E1843	E1844	E1845	E1846	E1847	E1848	E1849	E1850	E1851	E1852	E1853	E1854	E1855	E1856	E1857	E1858	E1859	E1860	E1861	E1862	E1863	E1864	E1865	E1866	E1867	E1868	E1869	E1870	E1871	E1872	E1873	E1874	E1875	E1876	E1877	E1878	E1879	E1880	E1881	E1882	E1883	E1884	E1885	E1886	E1887	E1888	E1889	E1890	E1891	E1892	E1893	E1894	E1895	E1896	E1897	E1898	E1899	E1900	E1901	E1902	E1903	E1904	E1905	E1906	E1907	E1908	E1909	E1910	E1911	E1912	E1913	E1914	E1915	E1916	E1917	E1918	E1919	E1920	E1921	E1922	E1923	E1924	E1925	E1926	E1927	E1928	E1929	E1930	E1931	E1932	E1933	E1934	E1935	E1936	E1937	E1938	E1939	E1940	E1941	E1942	E1943	E1944	E1945	E1946	E1947	E1948	E1949	E1950	E1951	E1952	E1953	E1954	E1955	E1956	E1957	E1958	E1959	E1960	E1961	E1962	E1963	E1964	E1965	E1966	E1967	E1968	E1969	E1970	E1971	E1972	E1973	E1974	E1975	E1976	E1977	E1978	E1979	E1980	E1981	E1982	E1983	E1984	E1985	E1986	E1987	E1988	E1989	E1990	E1991	E1992	E1993	E1994	E1995	E1996	E1997	E1998	E1999	E2000	E2001	E2002	E2003	E2004	E2005	E2006	E2007	E2008	E2009	E2010	E2011	E2012	E2013	E2014	E2015	E2016	E2017	E2018	E2019	E2020	E2021	E2022	E2023	E2024	E2025	E2026	E2027	E2028	E2029	E2030	E2031	E2032	E2033	E2034	E2035	E2036	E2037	E2038	E2039	E2040	E2041	E2042	E2043	E2044	E2045	E2046	E2047	E2048	E2049	E2050	E2051	E2052	E2053	E2054	E2055	E2056	E2057	E2058	E2059	E2060	E2061	E2062	E2063	E2064	E2065	E2066	E2067	E2068	E2069	E2070	E2071	E2072	E2073	E2074	E2075	E2076	E2077	E2078	E2079	E2080	E2081	E2082	E2083	E2084	E2085	E2086	E2087	E2088	E2089	E2090	E2091	E2092	E2093	E2094	E2095	E2096	E2097	E2098	E2099	E2100	E2101	E2102	E2103	E2104	E2105	E2106	E2107	E2108	E2109	E2110	E2111	E2112	E2113	E2114	E2115	E2116	E2117	E2118	E2119	E2120	E2121	E2122	E2123	E2124	E2125	E2126	E2127	E2128	E2129	E2130	E2131	E2132	E2133	E2134	E2135	E2136	E2137	E2138	E2139	E2140	E2141	E2142	E2143	E2144	E2145	E2146	E2147	E2148	E2149	E2150	E2151	E2152	E2153	E2154	E2155	E2156	E2157	E2158	E2159	E2160	E2161	E2162	E2163	E2164	E2165	E2166	E2167	E2168	E2169	E2170	E2171	E2172	E2173	E2174	E2175	E2176	E2177	E2178	E2179	E2180	E2181	E2182	E2183	E2184	E2185	E2186	E2187	E2188	E2189	E2190	E2191	E2192	E2193	E2194	E2195	E2196	E2197	E2198	E2199	E2200	E2201	E2202	E2203	E2204	E2205	E2206	E2207	E2208	E2209	E2210	E2211	E2212	E2213	E2214	E2215	E2216	E2217	E2218	E2219	E2220	E2221	E2222	E2223	E2224	E2225	E2226	E2227	E2228	E2229	E2230	E2231	E2232	E2233	E2234	E2235	E2236	E2237	E2238	E2239	E2240	E2241	E2242	E2243	E2244	E2245	E2246	E2247	E2248	E2249	E2250	E2251	E2252	E2253	E2254	E2255	E2256	E2257	E2258	E2259	E2260	E2261	E2262	E2263	E2264	E2265	E2266	E2267	E2268	E2269	E2270	E2271	E2272	E2273	E2274	E2275	E2276	E2277	E2278	E2279	E2280	E2281	E2282	E2283	E2284	E2285	E2286	E2287	E2288	E2289	E2290	E2291	E2292	E2293	E2294	E2295	E2296	E2297	E2298	E2299	E2300	E2301	E2302	E2303	E2304	E2305	E2306	E2307	E2308	E2309	E2310	E2311	E2312	E2313	E2314	E2315	E2316	E2317	E2318	E2319	E2320	E2321	E2322	E2323	E2324	E2325	E2326	E2327	E2328	E2329	E2330	E2331	E2332	E2333	E2334	E2335	E2336	E2337	E2338	E2339	E2340	E2341	E2342	E2343	E2344	E2345	E2346	E2347	E2348	E2349	E2350	E2351	E2352	E2353	E2354	E2355	E2356	E2357	E2358	E2359	E2360	E2361	E2362	E2363	E2364	E2365	E2366	E2367	E2368	E2369	E2370	E2371	E2372	E2373	E2374	E2375	E2376	E2377	E2378	E2379	E2380	E2381	E2382	E2383	E2384	E2385	E2386	E2387	E2388	E2389	E2390	E2391	E2392	E2393	E2394	E2395	E2396	E2397	E2398	E2399	E2400	E2401	E2402	E2403	E2404	E2405	E2406	E2407	E2408	E2409	E2410	E2411	E2412	E2413	E2414	E2415	E2416	E2417	E2418	E2419	E2420	E2421	E2422	E2423	E2424	E2425	E2426	E2427	E2428	E2429	E2430	E2431	E2432	E2433	E2434	E2435	E2436	E2437	E2438	E2439	E2440	E2441	E2442	E2443	E2444	E2445	E2446	E2447	E2448	E2449	E2450	E2451	E2452	E2453	E2454	E2455	E2456	E2457	E2458	E2459	E2460	E2461	E2462	E2463	E2464	E2465	E2466	E2467	E2468	E2469	E2470	E2471	E2472	E2473	E2474	E2475	E2476	E2477	E2478	E2479	E2480	E2481	E2482	E2483	E2484	E2485	E2486	E2487	E2488	E2489	E2490	E2491	E2492	E2493	E2494	E2495	E2496	E2497	E2498	E2499	E2500	E2501	E2502	E2503	E2504	E2505	E2506	E2507	E2508	E2509	E2510	E2511	E2512	E2513	E2514	E2515	E2516	E2517	E2518	E2519	E2520	E2521	E2522	E2523	E2524	E2525	E2526	E2527	E2528	E2529	E2530	E2531	E2532	E2533	E2534	E2535	E2536	E2537	E2538	E2539	E2540	E2541	E2542	E2543	E2544	E2545	E2546	E2547	E2548	E2549	E2550	E2551	E2552	E2553	E2554	E2555	E2556	E2557	E2558	E2559	E2560	E2561	E2562	E2563	E2564	E2565	E2566	E2567	E2568	E2569	E2570	E2571	E2572	E2573	E2574	E2575	E2576	E2577	E2578	E2579	E2580	E2581	E2582	E2583	E2584	E2585	E2586	E2587	E2588	E2589	E2590	E2591	E2592	E2593	E2594	E2595	E2596	E2597	E2598	E2599	E2600	E2601	E2602	E2603	E2604	E2605	E2606	E2607	E2608	E2609	E2610	E2611	E2612	E2613	E2614	E2615	E2616	E2617	E2618	E2619	E2620	E2621	E2622	E2623	E2624	E2625	E2626	E2627	E2628	E2629	E2630	E2631	E2632	E2633	E2634	E2635	E2636	E2637	E2638	E2639	E2640	E2641	E2642	E2643	E2644	E2645	E2646	E2647	E2648	E2649	E2650	E2651	E2652	E2653	E2654	E2655	E2656	E2657	E2658	E2659	E2660	E2661	E2662	E2663	E2664	E2665	E2666	E2667	E2668	E2669	E2670	E2671	E2672	E2673	E2674	E2675	E2676	E2677	E2678	E2679	E2680	E2681	E2682	E2683	E2684	E2685	E2686	E2687	E2688	E2689	E2690	E2691	E2692	E2693	E2694	E2695	E2696	E2697	E2698	E2699	E2700	E2701	E2702	E2703	E2704	E2705	E2706	E2707	E2708	E2709	E2710	E2711	E2712	E2713	E2714	E2715	E2716	E2717	E2718	E2719	E2720	E2721	E2722	E2723	E2724	E2725	E2726	E2727	E2728	E2729	E2730	E2731	E2732	E2733	E2734	E2735	E2736	E2737	E2738	E2739	E2740	E2741	E2742	E2743	E2744	E2745	E2746	E2747	E2748	E2749	E2750	E2751	E2752	E2753	E2754	E2755	E2756	E2757	E2758	E2759	E2760	E2761	E2762	E2763	E2764	E2765	E2766	E2767	E2768	E2769	E2770	E2771	E2772	E2773	E2774	E2775	E2776	E2777	E2778	E2779	E2780	E2781	E2782	E2783	E2784	E2785	E2786	E2787	E2788	E2789	E2790	E2791	E2792	E2793	E2794	E2795	E2796	E2797	E2798	E2799	E2800	E2801	E2802	E2803	E2804	E2805	E2806	E2807	E2808	E2809	E2810	E2811	E2812	E2813	E2814	E2815	E2816	E2817	E2818	E2819	E2820	E2821	E2822	E2823	E2824	E2825	E2826	E2827	E2828	E2829	E2830	E2831	E2832	E2833	E2834	E2835	E2836	E2837	E2838	E283
-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	------

4 Data and refinement statistics

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

Property	Value	Source
Space group	P 21 21 21	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	72.97Å 117.77Å 170.74Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	45.00 – 3.00	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	88.7 (45.00-3.00)	Depositor
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	7.60	Depositor
Refinement program	CNS 0.4	Depositor
R, R_{free}	0.228 , 0.268	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	9751	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	54.0	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: MG

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	0.54	0/1522	1.12	14/2056 (0.7%)
1	B	0.59	1/1537 (0.1%)	1.16	13/2075 (0.6%)
1	C	0.56	0/1514	1.45	31/2045 (1.5%)
1	D	0.54	0/1530	1.14	14/2065 (0.7%)
2	E	0.54	0/951	1.11	6/1280 (0.5%)
2	F	0.60	0/961	1.22	10/1293 (0.8%)
2	G	0.63	1/958 (0.1%)	1.33	14/1289 (1.1%)
2	H	0.53	0/951	1.56	27/1280 (2.1%)
All	All	0.57	2/9924 (0.0%)	1.26	129/13383 (1.0%)

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	C	0	1

All (2) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	G	1704	LYS	C-O	-7.77	1.14	1.24
1	B	290	MET	SD-CE	-6.32	1.63	1.79

The worst 5 of 129 bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	C	567	GLN	N-CA-C	-25.09	82.12	113.23
2	H	1469	MET	N-CA-C	-12.93	96.96	113.12
1	D	617	LEU	N-CA-C	-12.26	98.30	113.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	H	1519	LEU	N-CA-C	-12.15	92.70	110.20
2	H	1466	LEU	N-CA-C	-11.57	97.30	112.68

There are no chirality outliers.

All (1) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	C	570	TYR	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	1489	0	1437	87	0
1	B	1504	0	1463	120	0
1	C	1481	0	1419	179	0
1	D	1497	0	1449	123	1
2	E	940	0	970	89	1
2	F	950	0	987	84	0
2	G	947	0	983	170	0
2	H	940	0	970	112	0
3	E	1	0	0	0	0
3	F	1	0	0	0	0
3	H	1	0	0	0	0
All	All	9751	0	9678	914	1

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 47.

The worst 5 of 914 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)
2:H:1465:ILE:O	2:H:1469:MET:HB2	1.40	1.19
1:C:520:LEU:HD13	1:C:565:ILE:HD11	1.27	1.15
1:C:544:ARG:HH21	1:C:592:ASP:HA	1.10	1.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:G:1677:ARG:HB3	2:G:1699:LEU:HD11	1.31	1.13
2:G:1683:ALA:HA	2:G:1704:LYS:HE3	1.28	1.13

All (1) 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:D:743:ASP:O	2:E:1294:LYS:NZ[4_565]	1.99	0.21

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 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	179/182 (98%)	154 (86%)	22 (12%)	3 (2%)	7	32
1	B	180/182 (99%)	148 (82%)	24 (13%)	8 (4%)	2	12
1	C	179/182 (98%)	139 (78%)	23 (13%)	17 (10%)	0	2
1	D	180/182 (99%)	145 (81%)	27 (15%)	8 (4%)	2	12
2	E	117/119 (98%)	94 (80%)	19 (16%)	4 (3%)	3	17
2	F	117/119 (98%)	101 (86%)	13 (11%)	3 (3%)	4	23
2	G	117/119 (98%)	79 (68%)	26 (22%)	12 (10%)	0	2
2	H	117/119 (98%)	89 (76%)	15 (13%)	13 (11%)	0	1
All	All	1186/1204 (98%)	949 (80%)	169 (14%)	68 (6%)	1	8

5 of 68 Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	14	ASP
1	A	168	ASN
1	B	248	TYR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	B	300	ILE
1	B	307	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	164/167 (98%)	150 (92%)	14 (8%)	10	36
1	B	167/167 (100%)	145 (87%)	22 (13%)	4	18
1	C	161/167 (96%)	122 (76%)	39 (24%)	1	4
1	D	165/167 (99%)	150 (91%)	15 (9%)	9	33
2	E	102/105 (97%)	87 (85%)	15 (15%)	3	15
2	F	105/105 (100%)	81 (77%)	24 (23%)	1	5
2	G	104/105 (99%)	84 (81%)	20 (19%)	1	8
2	H	102/105 (97%)	85 (83%)	17 (17%)	2	12
All	All	1070/1088 (98%)	904 (84%)	166 (16%)	2	13

5 of 166 residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
2	F	1068	ARG
2	G	1692	GLU
2	F	1074	GLU
2	G	1622	VAL
2	H	1415	ILE

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. 5 of 47 such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
2	E	1275	ASN
2	G	1612	GLN
2	E	1291	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
2	F	1038	GLN
2	G	1632	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 oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry ⓘ

Of 3 ligands modelled in this entry, 3 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.