



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 13, 2026 – 07:57 PM UTC

PDB ID : 1G2V / pdb_00001g2v
Title : THE STRUCTURAL BASIS OF THE CATALYTIC MECHANISM AND REGULATION OF GLUCOSE-1-PHOSPHATE THYMIDYLYLTRANSFERASE (RMLA). TTP COMPLEX.
Authors : Blankenfeldt, W.; Asuncion, M.; Lam, J.S.; Naismith, J.H.
Deposited on : 2000-10-21
Resolution : 2.60 Å(reported)

This is a Full wwPDB X-ray Structure Validation 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
Mogul	:	2022.3.0, CSD as543be (2022)
Xtriage (Phenix)	:	2.0
EDS	:	3.0
Buster-report	:	wwPDB partial adaption of 1.1.7 (2018)
Percentile statistics	:	20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
CCP4	:	9.0.010 (Gargrove)
Density-Fitness	:	1.0.12
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.49

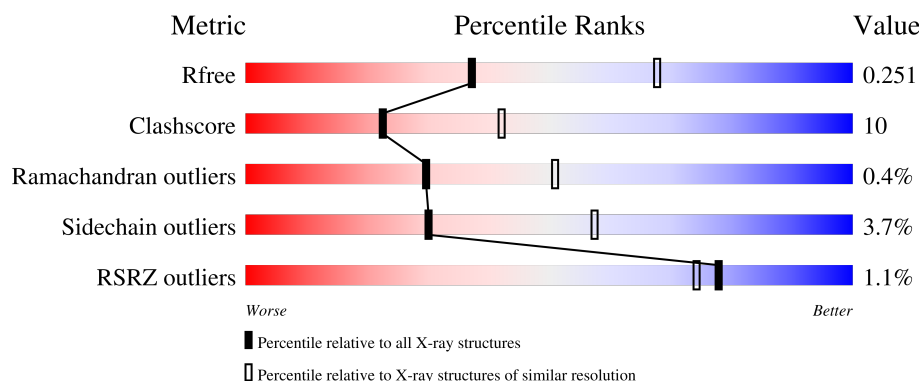
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 2.60 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))
R_{free}	180053	4008 (2.60-2.60)
Clashscore	190562	4347 (2.60-2.60)
Ramachandran outliers	187476	4277 (2.60-2.60)
Sidechain outliers	187428	4277 (2.60-2.60)
RSRZ outliers	180081	4008 (2.60-2.60)

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 $\leq 5\%$. 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.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	293	0% 74% 24% •
1	B	293	0% 72% 25% •
1	C	293	2% 70% 26% •
1	D	293	2% 68% 28% •

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	E	293	71%24%5%
1	F	293	% 72%26%
1	G	293	% 71%24%5%
1	H	293	% 71%25%

2 Entry composition

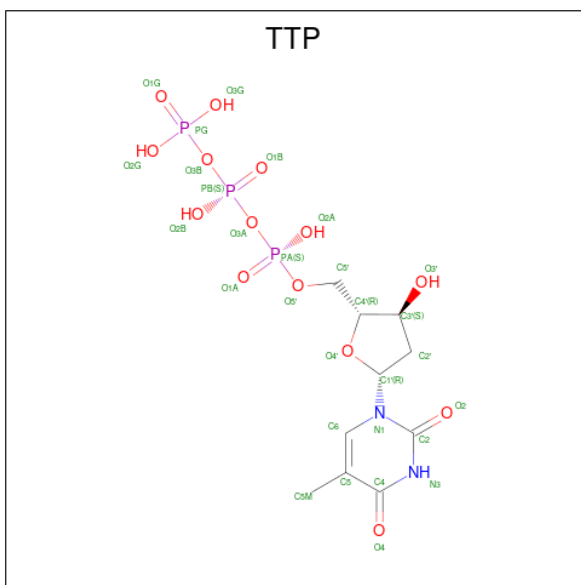
There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 18744 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

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 GLUCOSE-1-PHOSPHATE THYMIDYLYLTRANSFERASE.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	292	Total	C	N	O	S	0	0	0
			2285	1462	385	434	4			
1	B	292	Total	C	N	O	S	0	0	0
			2285	1462	385	434	4			
1	C	292	Total	C	N	O	S	0	0	0
			2285	1462	385	434	4			
1	D	292	Total	C	N	O	S	0	0	0
			2285	1462	385	434	4			
1	E	292	Total	C	N	O	S	0	0	0
			2285	1462	385	434	4			
1	F	292	Total	C	N	O	S	0	0	0
			2285	1462	385	434	4			
1	G	292	Total	C	N	O	S	0	0	0
			2285	1462	385	434	4			
1	H	292	Total	C	N	O	S	0	0	0
			2285	1462	385	434	4			

- Molecule 2 is THYMIDINE-5'-TRIPHOSPHATE (CCD ID: TTP) (formula: $C_{10}H_{17}N_2O_{14}P_3$).



Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	A	1	Total 29	C 10	N 2	O 14	P 3	0	0
2	A	1	Total 29	C 10	N 2	O 14	P 3	0	0
2	B	1	Total 29	C 10	N 2	O 14	P 3	0	0
2	B	1	Total 29	C 10	N 2	O 14	P 3	0	0
2	C	1	Total 29	C 10	N 2	O 14	P 3	0	0
2	C	1	Total 29	C 10	N 2	O 14	P 3	0	0
2	D	1	Total 29	C 10	N 2	O 14	P 3	0	0
2	D	1	Total 29	C 10	N 2	O 14	P 3	0	0
2	E	1	Total 29	C 10	N 2	O 14	P 3	0	0
2	E	1	Total 29	C 10	N 2	O 14	P 3	0	0
2	F	1	Total 29	C 10	N 2	O 14	P 3	0	0
2	F	1	Total 29	C 10	N 2	O 14	P 3	0	0
2	G	1	Total 29	C 10	N 2	O 14	P 3	0	0
2	G	1	Total 29	C 10	N 2	O 14	P 3	0	0

Continued on next page...

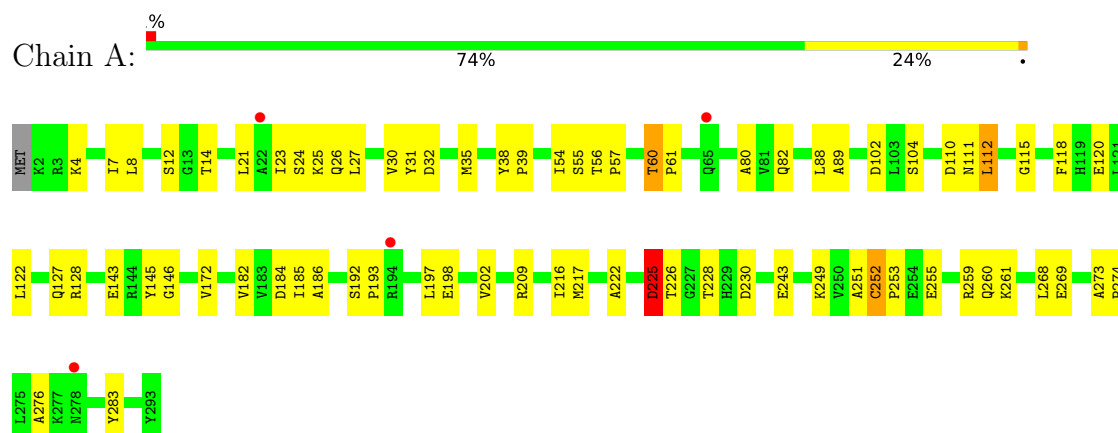
Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	H	1	Total	C	N	O	P	0	0
			29	10	2	14	3		
2	H	1	Total	C	N	O	P	0	0
			29	10	2	14	3		

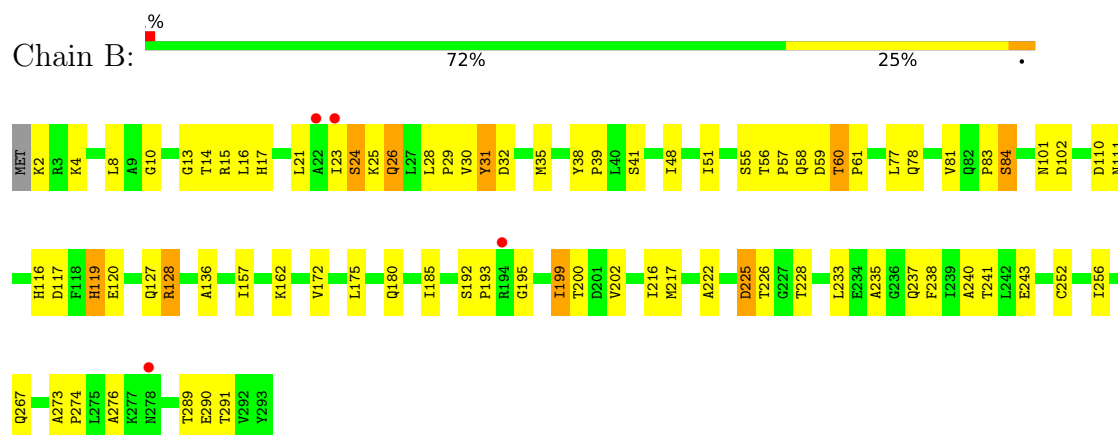
3 Residue-property plots [i](#)

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 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.

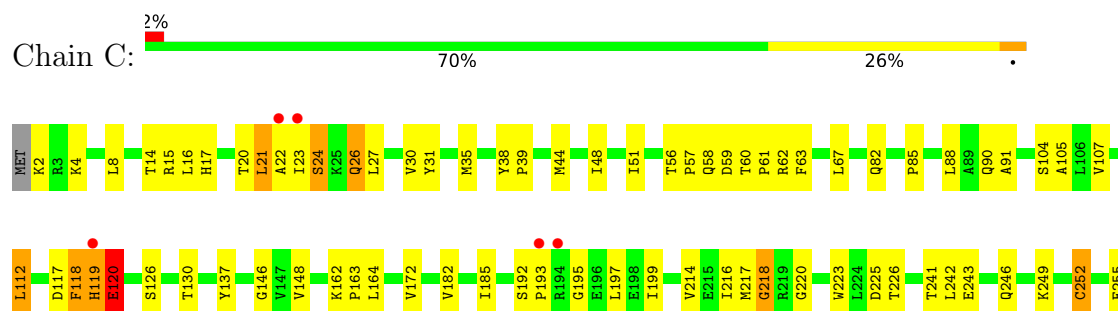
• Molecule 1: GLUCOSE-1-PHOSPHATE THYMIDYLTRANSFERASE

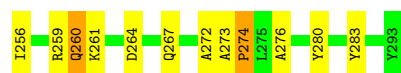


• Molecule 1: GLUCOSE-1-PHOSPHATE THYMIDYLTRANSFERASE

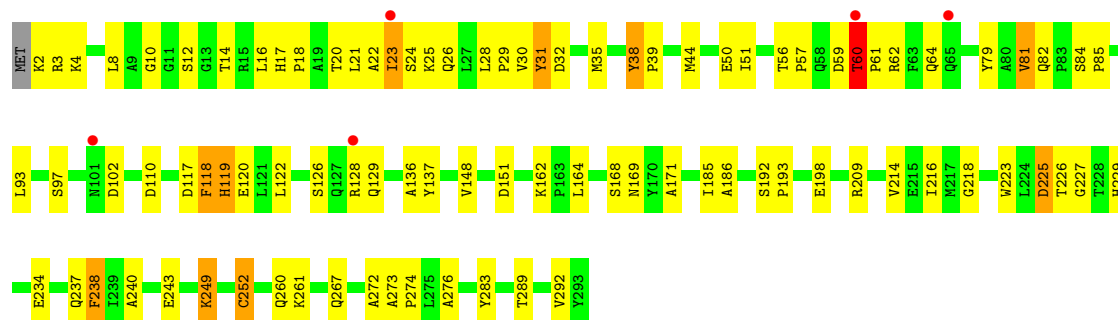


• Molecule 1: GLUCOSE-1-PHOSPHATE THYMIDYLTRANSFERASE

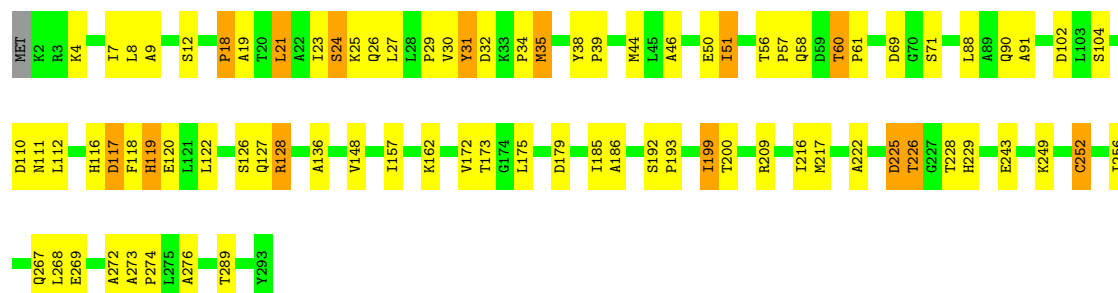




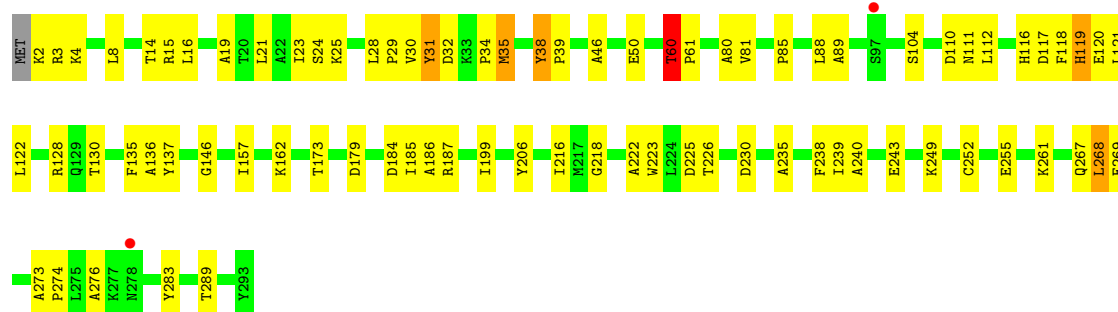
● Molecule 1: GLUCOSE-1-PHOSPHATE THYMIDYLYLTRANSFERASE



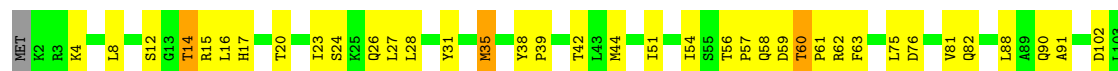
● Molecule 1: GLUCOSE-1-PHOSPHATE THYMIDYLYLTRANSFERASE

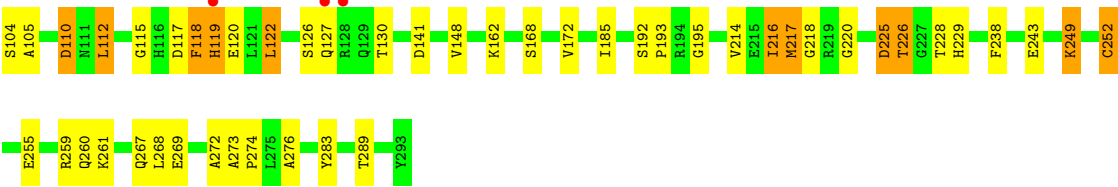


● Molecule 1: GLUCOSE-1-PHOSPHATE THYMIDYLYLTRANSFERASE



● Molecule 1: GLUCOSE-1-PHOSPHATE THYMIDYLYLTRANSFERASE





● Molecule 1: GLUCOSE-1-PHOSPHATE THYMIDYLYLTRANSFERASE



4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 1 21 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	73.02Å 134.36Å 140.90Å 90.00° 98.22° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	100.00 – 2.60 100.00 – 2.60	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	91.4 (100.00-2.60) 91.4 (100.00-2.60)	Depositor EDS
R_{merge}	0.07	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	5.33 (at 2.61Å)	Xtrriage
Refinement program	REFMAC	Depositor
R, R_{free}	0.215 , 0.242 0.225 , 0.251	Depositor DCC
R_{free} test set	3797 reflections (5.03%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	27.6	Xtrriage
Anisotropy	0.227	Xtrriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.33 , 19.5	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.52$, $\langle L^2 \rangle = 0.36$	Xtrriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtrriage
F_o, F_c correlation	0.93	EDS
Total number of atoms	18744	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	13.0	wwPDB-VP

Xtrriage's analysis on translational NCS is as follows: *The analyses of the Patterson function reveals a significant off-origin peak that is 49.28 % of the origin peak, indicating pseudo-translational symmetry. The chance of finding a peak of this or larger height randomly in a structure without pseudo-translational symmetry is equal to 7.6250e-05. The detected translational NCS is most likely also responsible for the elevated intensity ratio.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

²Theoretical values of $\langle |L| \rangle$, $\langle L^2 \rangle$ for acentric reflections are 0.5, 0.333 respectively for untwinned datasets, and 0.375, 0.2 for perfectly twinned datasets.

5 Model quality ⓘ

5.1 Standard geometry ⓘ

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

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	1.58	17/2335 (0.7%)	1.36	9/3168 (0.3%)
1	B	1.61	22/2335 (0.9%)	1.42	10/3168 (0.3%)
1	C	1.54	15/2335 (0.6%)	1.38	15/3168 (0.5%)
1	D	1.59	19/2335 (0.8%)	1.43	18/3168 (0.6%)
1	E	1.60	21/2335 (0.9%)	1.38	12/3168 (0.4%)
1	F	1.83	25/2335 (1.1%)	1.42	10/3168 (0.3%)
1	G	1.57	18/2335 (0.8%)	1.43	15/3168 (0.5%)
1	H	1.54	14/2335 (0.6%)	1.42	17/3168 (0.5%)
All	All	1.61	151/18680 (0.8%)	1.41	106/25344 (0.4%)

All (151) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	F	35	MET	SD-CE	-33.83	0.94	1.79
1	F	162	LYS	C-O	-15.28	1.16	1.23
1	E	162	LYS	C-O	-10.17	1.18	1.23
1	G	44	MET	SD-CE	-10.13	1.54	1.79
1	F	235	ALA	CA-CB	-9.50	1.38	1.53
1	A	7	ILE	CA-CB	-9.18	1.43	1.54
1	A	89	ALA	CA-CB	-8.85	1.37	1.53
1	A	185	ILE	CA-CB	-8.68	1.43	1.54
1	D	35	MET	SD-CE	-8.38	1.58	1.79
1	D	186	ALA	CA-CB	-8.38	1.39	1.53
1	C	35	MET	SD-CE	-8.16	1.59	1.79
1	A	222	ALA	CA-CB	-8.00	1.42	1.53
1	H	217	MET	SD-CE	-7.86	1.59	1.79
1	B	162	LYS	C-O	-7.86	1.20	1.23
1	D	249	LYS	CA-C	-7.86	1.43	1.52
1	H	249	LYS	CA-C	-7.83	1.43	1.52
1	F	35	MET	CG-SD	-7.79	1.61	1.80
1	B	235	ALA	CA-CB	-7.72	1.41	1.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	F	186	ALA	CA-CB	-7.63	1.40	1.53
1	A	217	MET	SD-CE	-7.48	1.60	1.79
1	E	148	VAL	C-O	-7.45	1.16	1.24
1	B	202	VAL	CA-CB	-7.44	1.45	1.54
1	H	185	ILE	CA-CB	-7.38	1.45	1.54
1	G	51	ILE	CA-CB	-7.34	1.44	1.54
1	G	35	MET	SD-CE	-7.33	1.61	1.79
1	F	199	ILE	CA-CB	-7.32	1.43	1.54
1	B	30	VAL	CA-CB	-7.29	1.45	1.53
1	A	202	VAL	CA-CB	-7.28	1.45	1.54
1	A	30	VAL	CA-CB	-7.18	1.45	1.53
1	D	81	VAL	CA-CB	-7.17	1.44	1.54
1	A	35	MET	SD-CE	-7.17	1.61	1.79
1	G	168	SER	CA-C	-7.17	1.44	1.52
1	H	186	ALA	CA-CB	-7.08	1.41	1.53
1	B	81	VAL	CA-CB	-7.05	1.45	1.54
1	D	136	ALA	CA-CB	-7.05	1.41	1.53
1	F	216	ILE	CA-CB	-6.97	1.45	1.54
1	D	171	ALA	CA-CB	-6.91	1.42	1.53
1	A	82	GLN	C-O	-6.88	1.16	1.24
1	F	60	THR	CA-CB	-6.86	1.45	1.53
1	D	226	THR	N-CA	-6.86	1.37	1.46
1	A	172	VAL	CA-CB	-6.85	1.45	1.54
1	B	217	MET	SD-CE	-6.78	1.62	1.79
1	E	185	ILE	CA-CB	-6.74	1.45	1.54
1	G	216	ILE	CA-CB	-6.74	1.45	1.54
1	F	30	VAL	CA-CB	-6.73	1.45	1.53
1	F	185	ILE	CA-CB	-6.72	1.45	1.54
1	G	226	THR	N-CA	-6.69	1.38	1.46
1	D	216	ILE	CA-CB	-6.63	1.45	1.54
1	D	168	SER	CA-C	-6.60	1.44	1.52
1	G	214	VAL	CA-CB	-6.58	1.45	1.53
1	E	7	ILE	CA-CB	-6.49	1.46	1.54
1	D	162	LYS	C-O	-6.45	1.20	1.23
1	C	185	ILE	CA-CB	-6.39	1.47	1.54
1	C	82	GLN	C-O	-6.38	1.17	1.24
1	E	46	ALA	CA-CB	-6.36	1.42	1.53
1	E	9	ALA	CA-CB	-6.35	1.42	1.53
1	G	217	MET	SD-CE	-6.33	1.63	1.79
1	E	30	VAL	CA-CB	-6.33	1.46	1.53
1	C	105	ALA	CA-CB	-6.32	1.43	1.53
1	H	35	MET	SD-CE	-6.31	1.63	1.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	D	185	ILE	CA-CB	-6.26	1.47	1.54
1	F	128	ARG	NE-CZ	-6.25	1.26	1.33
1	A	186	ALA	CA-CB	-6.24	1.43	1.53
1	H	216	ILE	CA-CB	-6.12	1.46	1.54
1	D	44	MET	SD-CE	-6.11	1.64	1.79
1	G	105	ALA	CA-CB	-6.09	1.43	1.53
1	E	44	MET	SD-CE	-6.08	1.64	1.79
1	G	185	ILE	CA-CB	-6.07	1.46	1.54
1	B	35	MET	SD-CE	-6.07	1.64	1.79
1	F	85	PRO	CA-C	-6.05	1.47	1.52
1	C	48	ILE	CA-CB	-6.05	1.46	1.54
1	G	249	LYS	CA-C	-6.05	1.45	1.52
1	F	46	ALA	CA-CB	-6.02	1.44	1.53
1	E	222	ALA	CA-CB	-5.94	1.44	1.53
1	D	81	VAL	C-O	-5.92	1.17	1.24
1	C	44	MET	SD-CE	-5.91	1.64	1.79
1	D	214	VAL	C-O	-5.90	1.17	1.24
1	E	35	MET	SD-CE	-5.86	1.64	1.79
1	B	84	SER	CA-CB	-5.86	1.45	1.54
1	F	38	TYR	CA-C	5.81	1.59	1.52
1	G	102	ASP	C-O	-5.81	1.16	1.23
1	F	179	ASP	C-O	-5.79	1.18	1.23
1	H	133	SER	C-O	-5.72	1.17	1.24
1	B	48	ILE	CA-CB	-5.70	1.47	1.54
1	B	216	ILE	C-O	-5.65	1.16	1.24
1	C	172	VAL	C-O	-5.65	1.17	1.24
1	E	199	ILE	CA-CB	-5.63	1.46	1.54
1	C	214	VAL	CA-CB	-5.59	1.46	1.53
1	B	228	THR	CA-C	-5.55	1.45	1.52
1	G	75	LEU	C-O	-5.55	1.16	1.23
1	G	42	THR	CA-CB	-5.54	1.44	1.53
1	F	136	ALA	CA-CB	-5.54	1.44	1.53
1	H	162	LYS	C-O	-5.52	1.21	1.23
1	D	38	TYR	N-CA	5.51	1.50	1.46
1	E	136	ALA	CA-CB	-5.50	1.45	1.53
1	B	77	LEU	C-O	-5.49	1.17	1.23
1	B	291	THR	CA-CB	-5.48	1.45	1.53
1	H	36	ILE	C-O	-5.48	1.15	1.23
1	D	3	ARG	CA-C	-5.48	1.46	1.52
1	A	228	THR	CA-C	-5.47	1.46	1.52
1	F	80	ALA	CA-CB	-5.47	1.44	1.53
1	B	48	ILE	C-O	-5.43	1.18	1.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	F	81	VAL	CA-C	-5.42	1.46	1.52
1	B	185	ILE	CA-CB	-5.41	1.47	1.54
1	C	107	VAL	CA-CB	-5.41	1.47	1.54
1	F	206	TYR	C-O	5.39	1.30	1.24
1	F	130	THR	C-O	-5.37	1.17	1.23
1	E	18	PRO	CG-CD	-5.35	1.37	1.51
1	H	116	HIS	CA-CB	-5.35	1.44	1.53
1	B	60	THR	C-O	-5.34	1.19	1.24
1	E	128	ARG	NE-CZ	-5.31	1.27	1.33
1	H	30	VAL	CA-CB	-5.31	1.47	1.53
1	B	199	ILE	CA-CB	-5.31	1.47	1.54
1	G	238	PHE	C-O	-5.31	1.18	1.24
1	A	143	GLU	C-O	-5.30	1.17	1.24
1	A	198	GLU	N-CA	-5.30	1.39	1.46
1	F	289	THR	CA-CB	-5.29	1.45	1.53
1	D	97	SER	CA-C	-5.27	1.45	1.52
1	B	172	VAL	CA-CB	-5.27	1.47	1.54
1	C	217	MET	SD-CE	-5.26	1.66	1.79
1	A	182	VAL	C-O	-5.25	1.18	1.24
1	H	118	PHE	CA-C	-5.25	1.46	1.52
1	D	238	PHE	C-O	-5.24	1.18	1.24
1	E	289	THR	CA-C	-5.23	1.46	1.52
1	H	216	ILE	C-O	-5.21	1.17	1.24
1	C	241	THR	CA-CB	-5.21	1.45	1.53
1	F	89	ALA	C-O	-5.20	1.17	1.24
1	E	256	ILE	CA-CB	-5.20	1.47	1.54
1	F	222	ALA	CA-CB	-5.18	1.46	1.53
1	E	175	LEU	C-O	-5.18	1.18	1.23
1	B	222	ALA	CA-CB	-5.17	1.45	1.53
1	C	30	VAL	CA-CB	-5.17	1.47	1.53
1	A	197	LEU	CA-C	5.15	1.59	1.52
1	E	157	ILE	CA-C	-5.15	1.46	1.52
1	E	249	LYS	CA-C	-5.14	1.46	1.52
1	D	30	VAL	CA-CB	-5.13	1.47	1.53
1	G	110	ASP	CA-C	-5.11	1.46	1.52
1	F	3	ARG	C-O	-5.11	1.17	1.24
1	B	128	ARG	NE-CZ	-5.10	1.27	1.33
1	H	38	TYR	N-CA	5.09	1.50	1.46
1	E	172	VAL	C-O	-5.08	1.18	1.24
1	B	136	ALA	CA-CB	-5.08	1.44	1.53
1	E	186	ALA	CA-CB	-5.08	1.44	1.53
1	C	182	VAL	CA-CB	5.08	1.60	1.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	C	22	ALA	CA-CB	5.06	1.61	1.53
1	B	175	LEU	C-O	-5.06	1.18	1.23
1	G	162	LYS	C-O	-5.06	1.21	1.23
1	A	172	VAL	CA-C	-5.04	1.47	1.52
1	G	141	ASP	CA-C	5.03	1.58	1.53
1	F	218	GLY	C-O	-5.03	1.16	1.23
1	C	51	ILE	CA-CB	-5.03	1.47	1.54

All (106) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	H	21	LEU	N-CA-C	-8.84	101.56	111.82
1	G	118	PHE	N-CA-C	-8.81	101.65	111.07
1	H	218	GLY	N-CA-C	8.65	121.85	112.33
1	H	14	THR	N-CA-C	8.42	120.45	111.28
1	G	216	ILE	CB-CA-C	-7.88	100.91	111.15
1	E	252	CYS	CB-CA-C	7.61	117.71	110.17
1	C	216	ILE	CB-CA-C	-7.54	101.35	111.15
1	C	21	LEU	N-CA-C	-7.46	103.98	113.23
1	G	252	CYS	CB-CA-C	7.38	117.85	110.33
1	F	216	ILE	CB-CA-C	-7.29	101.67	111.15
1	B	21	LEU	N-CA-C	-7.08	104.11	112.89
1	A	276	ALA	N-CA-C	6.95	119.71	111.71
1	A	252	CYS	CB-CA-C	6.90	116.65	110.44
1	E	128	ARG	N-CA-C	-6.84	100.31	110.23
1	A	216	ILE	CB-CA-C	-6.76	101.75	111.34
1	E	276	ALA	N-CA-C	6.63	119.34	111.71
1	G	115	GLY	N-CA-C	6.63	119.92	111.37
1	D	120	GLU	N-CA-C	-6.57	103.95	112.23
1	F	21	LEU	N-CA-C	-6.53	104.80	112.89
1	D	14	THR	N-CA-C	6.52	118.39	111.28
1	H	118	PHE	N-CA-C	-6.46	104.24	111.28
1	C	118	PHE	N-CA-C	-6.44	104.18	111.07
1	B	289	THR	CB-CA-C	-6.43	100.31	110.85
1	F	157	ILE	CB-CA-C	-6.43	104.34	110.70
1	A	225	ASP	CB-CA-C	6.37	121.96	109.35
1	B	157	ILE	CB-CA-C	-6.25	104.51	110.70
1	H	115	GLY	N-CA-C	6.23	119.40	111.37
1	G	122	LEU	N-CA-C	-6.20	104.44	111.14
1	D	216	ILE	CB-CA-C	-6.13	103.19	111.15
1	F	218	GLY	N-CA-C	6.12	119.06	112.33
1	E	226	THR	OG1-CB-CG2	-6.05	97.21	109.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	G	120	GLU	N-CA-C	-6.00	104.31	111.69
1	E	216	ILE	CB-CA-C	-5.97	102.86	111.34
1	G	51	ILE	N-CA-C	5.95	117.26	108.45
1	D	276	ALA	N-CA-C	5.93	119.62	112.38
1	B	119	HIS	CB-CA-C	5.92	122.69	110.31
1	A	184	ASP	N-CA-CB	5.91	119.44	110.28
1	C	112	LEU	N-CA-CB	-5.90	101.51	110.77
1	C	252	CYS	CB-CA-C	5.88	116.00	110.17
1	B	51	ILE	N-CA-C	5.87	117.14	108.45
1	H	152	GLN	CA-CB-CG	-5.87	102.35	114.10
1	F	19	ALA	CA-C-N	-5.85	113.31	122.73
1	F	19	ALA	C-N-CA	-5.85	113.31	122.73
1	D	289	THR	CB-CA-C	-5.84	101.28	110.85
1	D	225	ASP	CB-CA-C	5.84	120.90	109.35
1	C	172	VAL	CB-CA-C	-5.83	103.91	110.96
1	A	146	GLY	N-CA-C	-5.82	102.88	111.03
1	E	225	ASP	CB-CA-C	5.82	120.88	109.35
1	F	268	LEU	N-CA-C	-5.82	104.85	111.07
1	D	118	PHE	N-CA-C	-5.80	104.87	111.07
1	F	276	ALA	N-CA-C	5.77	119.42	112.38
1	C	226	THR	OG1-CB-CG2	-5.73	97.83	109.30
1	D	252	CYS	CB-CA-C	5.67	115.55	110.44
1	E	289	THR	CB-CA-C	-5.67	100.89	110.64
1	G	14	THR	N-CA-C	5.65	120.70	111.37
1	B	225	ASP	CB-CA-C	5.65	120.54	109.35
1	H	51	ILE	N-CA-C	5.61	115.75	108.35
1	H	200	THR	OG1-CB-CG2	-5.60	98.10	109.30
1	D	292	VAL	CB-CA-C	-5.55	102.88	110.77
1	B	84	SER	CA-CB-OG	-5.49	100.12	111.10
1	H	276	ALA	N-CA-C	5.49	119.08	112.38
1	D	198	GLU	N-CA-C	5.49	117.65	109.25
1	G	289	THR	CB-CA-C	-5.47	101.24	110.44
1	D	85	PRO	CB-CA-C	-5.46	105.67	113.09
1	E	21	LEU	N-CA-C	-5.44	105.35	111.28
1	D	93	LEU	N-CA-C	-5.42	104.79	111.40
1	C	274	PRO	CB-CA-C	-5.41	104.17	111.85
1	F	119	HIS	CB-CA-C	5.40	121.60	110.31
1	B	276	ALA	N-CA-C	5.37	118.93	112.38
1	D	129	GLN	CA-CB-CG	-5.35	103.39	114.10
1	D	51	ILE	N-CA-C	5.34	116.36	108.45
1	C	146	GLY	N-CA-C	-5.34	103.55	111.03
1	C	218	GLY	N-CA-C	5.34	119.37	112.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	D	60	THR	CA-C-O	5.34	123.54	118.63
1	G	276	ALA	N-CA-C	5.32	119.03	112.54
1	E	217	MET	N-CA-C	-5.30	98.61	107.99
1	D	218	GLY	N-CA-C	5.29	119.32	112.54
1	B	128	ARG	N-CA-C	-5.29	102.56	110.23
1	C	197	LEU	N-CA-C	-5.28	99.91	108.41
1	B	29	PRO	CB-CA-C	-5.27	103.42	110.85
1	G	127	GLN	CA-C-N	-5.26	113.59	120.95
1	G	127	GLN	C-N-CA	-5.26	113.59	120.95
1	H	112	LEU	N-CA-CB	-5.26	102.52	110.77
1	A	115	GLY	N-CA-C	5.23	118.12	111.37
1	D	128	ARG	CB-CA-C	-5.20	101.79	109.90
1	G	225	ASP	CB-CA-C	5.18	119.62	109.35
1	C	276	ALA	N-CA-C	5.18	118.86	112.54
1	H	202	VAL	CB-CA-C	-5.17	105.09	112.22
1	F	146	GLY	N-CA-C	-5.15	103.81	111.03
1	C	120	GLU	N-CA-C	-5.14	105.75	112.23
1	H	146	GLY	N-CA-C	-5.12	103.86	111.03
1	G	112	LEU	N-CA-CB	-5.11	102.44	110.77
1	C	85	PRO	CB-CA-C	-5.09	106.16	113.09
1	G	172	VAL	CB-CA-C	-5.09	104.80	110.96
1	H	216	ILE	CB-CA-C	-5.09	104.11	111.34
1	H	55	SER	N-CA-C	5.08	115.24	108.38
1	H	120	GLU	N-CA-C	-5.08	105.83	112.23
1	E	173	THR	OG1-CB-CG2	-5.07	99.15	109.30
1	A	112	LEU	N-CA-CB	-5.06	102.82	110.77
1	A	182	VAL	N-CA-C	5.05	115.27	110.42
1	E	119	HIS	CB-CA-C	5.03	120.50	109.99
1	D	227	GLY	N-CA-C	5.03	119.20	112.77
1	H	224	LEU	CA-C-N	-5.03	114.78	122.62
1	H	224	LEU	C-N-CA	-5.03	114.78	122.62
1	C	217	MET	N-CA-C	-5.02	99.11	107.99
1	E	51	ILE	N-CA-C	5.02	115.88	108.45

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

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	2285	0	2272	41	0
1	B	2285	0	2272	48	0
1	C	2285	0	2272	53	0
1	D	2285	0	2272	55	0
1	E	2285	0	2272	43	1
1	F	2285	0	2272	62	0
1	G	2285	0	2272	53	0
1	H	2285	0	2272	49	1
2	A	58	0	26	3	0
2	B	58	0	26	4	0
2	C	58	0	26	3	0
2	D	58	0	26	3	0
2	E	58	0	26	2	0
2	F	58	0	26	3	0
2	G	58	0	26	3	0
2	H	58	0	26	3	0
All	All	18744	0	18384	388	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 10.

All (388) 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:F:35:MET:CG	1:F:35:MET:CE	1.98	1.40
1:F:35:MET:CE	1:F:35:MET:SD	0.95	1.04
1:F:23:ILE:CG2	1:F:28:LEU:HD21	1.87	1.03
1:F:35:MET:SD	1:F:35:MET:HE3	1.56	0.98
1:F:35:MET:SD	1:F:35:MET:HE1	1.56	0.96
1:F:35:MET:SD	1:F:35:MET:HE2	1.56	0.96
1:A:23:ILE:HG13	1:A:24:SER:N	1.80	0.94
1:F:35:MET:HE1	1:F:226:THR:OG1	1.70	0.90
1:B:23:ILE:CG2	1:B:28:LEU:HD21	2.02	0.89
1:H:23:ILE:HD11	1:H:62:ARG:HD3	1.54	0.89
1:F:23:ILE:HG23	1:F:28:LEU:HD21	1.55	0.88
1:F:23:ILE:HG21	1:F:28:LEU:CD2	2.05	0.87
1:B:15:ARG:HB2	2:B:3502:TTP:O1G	1.75	0.86
1:D:119:HIS:C	1:D:119:HIS:CD2	2.51	0.86
1:A:23:ILE:HD11	1:A:27:LEU:HD12	1.59	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:F:15:ARG:HB2	2:F:3510:TTP:O1G	1.78	0.84
1:D:2:LYS:NZ	1:D:50:GLU:OE1	2.12	0.83
1:A:23:ILE:HG13	1:A:24:SER:H	1.40	0.82
1:D:119:HIS:HD2	1:D:119:HIS:O	1.60	0.82
1:D:119:HIS:CD2	1:D:119:HIS:O	2.33	0.82
1:B:23:ILE:HG21	1:B:28:LEU:CD2	2.09	0.82
1:F:23:ILE:CG2	1:F:28:LEU:CD2	2.58	0.82
1:C:119:HIS:C	1:C:119:HIS:CD2	2.60	0.79
1:G:119:HIS:C	1:G:119:HIS:CD2	2.60	0.79
1:H:119:HIS:C	1:H:119:HIS:CD2	2.60	0.78
1:H:23:ILE:HD11	1:H:62:ARG:CD	2.13	0.78
1:B:23:ILE:HG23	1:B:23:ILE:O	1.83	0.75
1:F:23:ILE:HG21	1:F:28:LEU:HD21	1.64	0.75
1:D:4:LYS:NZ	1:D:102:ASP:OD2	2.19	0.75
1:E:8:LEU:HG	2:E:3508:TTP:O2	1.87	0.75
1:G:24:SER:HB2	1:G:59:ASP:OD2	1.86	0.75
1:D:24:SER:HB2	1:D:59:ASP:OD2	1.87	0.74
1:E:8:LEU:HG	2:E:3508:TTP:C2	2.24	0.73
1:C:256:ILE:O	1:C:260:GLN:HG2	1.91	0.70
1:E:120:GLU:N	1:E:120:GLU:OE1	2.24	0.70
1:B:23:ILE:HG21	1:B:28:LEU:HD21	1.68	0.69
1:D:23:ILE:CG1	1:D:24:SER:H	2.06	0.69
1:H:23:ILE:HG12	1:H:24:SER:H	1.57	0.68
1:B:23:ILE:CG2	1:B:28:LEU:CD2	2.70	0.67
1:G:14:THR:HA	1:G:17:HIS:ND1	2.09	0.66
1:C:23:ILE:HD12	1:D:23:ILE:HG21	1.77	0.66
1:G:23:ILE:HD12	1:H:23:ILE:HG21	1.76	0.65
1:D:119:HIS:C	1:D:119:HIS:HD2	1.98	0.65
1:H:119:HIS:HD2	1:H:119:HIS:O	1.78	0.65
1:A:4:LYS:NZ	1:A:102:ASP:OD2	2.22	0.65
1:E:29:PRO:HD3	1:F:28:LEU:HD22	1.78	0.65
1:E:273:ALA:N	1:E:274:PRO:HD2	2.11	0.64
1:B:23:ILE:CG2	1:B:23:ILE:O	2.47	0.63
1:C:58:GLN:HE21	1:C:62:ARG:HH22	1.45	0.63
1:E:192:SER:HB2	1:E:193:PRO:HD2	1.79	0.63
1:G:119:HIS:HD2	1:G:119:HIS:O	1.82	0.62
1:H:119:HIS:CD2	1:H:119:HIS:O	2.53	0.62
1:F:35:MET:HE1	1:F:226:THR:HG21	1.81	0.61
1:B:78:GLN:HG2	1:H:61:PRO:HG3	1.82	0.61
1:H:8:LEU:HG	2:H:3514:TTP:C2	2.34	0.61
1:D:23:ILE:CG1	1:D:24:SER:N	2.63	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:F:35:MET:HE1	1:F:226:THR:CB	2.30	0.61
1:D:10:GLY:N	2:D:3506:TTP:O2	2.27	0.61
1:A:8:LEU:HG	2:A:3500:TTP:C2	2.36	0.61
1:G:14:THR:O	1:G:15:ARG:C	2.39	0.60
1:C:14:THR:O	1:C:15:ARG:C	2.43	0.60
1:G:119:HIS:CD2	1:G:119:HIS:O	2.55	0.60
1:H:119:HIS:C	1:H:119:HIS:HD2	2.07	0.59
1:A:8:LEU:HG	2:A:3500:TTP:O2	2.03	0.59
1:B:4:LYS:NZ	1:B:102:ASP:OD2	2.23	0.59
1:B:23:ILE:HG23	1:B:28:LEU:HD21	1.81	0.59
1:E:23:ILE:HG21	1:F:23:ILE:HD12	1.84	0.59
1:G:119:HIS:C	1:G:119:HIS:HD2	2.06	0.59
1:G:15:ARG:NE	2:G:3512:TTP:O1G	2.30	0.59
1:H:249:LYS:HD2	1:H:283:TYR:CG	2.38	0.59
1:F:35:MET:CE	1:F:226:THR:HG21	2.33	0.59
1:F:35:MET:HE2	1:F:35:MET:HG3	1.78	0.59
1:A:23:ILE:HD11	1:A:27:LEU:CD1	2.29	0.59
1:C:192:SER:HB2	1:C:193:PRO:HD2	1.85	0.58
1:C:119:HIS:C	1:C:119:HIS:HD2	2.06	0.58
1:E:4:LYS:NZ	1:E:102:ASP:OD2	2.29	0.58
1:B:110:ASP:HB2	1:B:226:THR:OG1	2.04	0.58
1:A:110:ASP:HB2	1:A:226:THR:OG1	2.03	0.58
1:G:110:ASP:HB2	1:G:226:THR:OG1	2.04	0.58
1:F:112:LEU:C	1:F:112:LEU:HD23	2.28	0.57
1:G:27:LEU:HD21	1:G:63:PHE:CE2	2.39	0.57
1:B:23:ILE:HG21	1:B:28:LEU:HD23	1.86	0.57
1:B:192:SER:HB2	1:B:193:PRO:HD2	1.86	0.57
1:D:192:SER:HB2	1:D:193:PRO:HD2	1.86	0.57
1:G:27:LEU:HD21	1:G:63:PHE:CD2	2.39	0.57
1:C:280:TYR:CD1	1:D:18:PRO:HD3	2.38	0.57
1:G:192:SER:HB2	1:G:193:PRO:HD2	1.85	0.57
1:F:23:ILE:HD13	1:F:28:LEU:HD23	1.87	0.57
1:A:111:ASN:HD22	1:A:111:ASN:N	2.01	0.57
1:C:119:HIS:HD2	1:C:119:HIS:O	1.88	0.56
1:H:243:GLU:HG2	1:H:249:LYS:HA	1.87	0.56
1:E:38:TYR:HB2	1:E:39:PRO:HD3	1.87	0.56
1:H:4:LYS:NZ	1:H:102:ASP:OD2	2.28	0.56
1:E:116:HIS:O	1:E:117:ASP:HB2	2.05	0.56
1:G:14:THR:HA	1:G:17:HIS:CE1	2.40	0.56
1:C:38:TYR:HB2	1:C:39:PRO:HD3	1.87	0.56
1:F:35:MET:CG	1:F:35:MET:HE3	2.04	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:G:38:TYR:HB2	1:G:39:PRO:HD3	1.86	0.56
1:A:38:TYR:HB2	1:A:39:PRO:HD3	1.87	0.56
1:B:273:ALA:N	1:B:274:PRO:HD2	2.20	0.56
1:F:35:MET:HE1	1:F:226:THR:CG2	2.35	0.56
1:B:10:GLY:N	2:B:3502:TTP:O2	2.35	0.55
1:G:27:LEU:CD2	1:G:63:PHE:CE2	2.90	0.55
1:G:58:GLN:CD	1:G:58:GLN:H	2.15	0.55
1:H:23:ILE:HG12	1:H:24:SER:N	2.20	0.55
1:A:112:LEU:C	1:A:112:LEU:HD23	2.32	0.55
1:F:35:MET:HE3	1:F:35:MET:CB	2.37	0.55
1:D:23:ILE:HG13	1:D:24:SER:H	1.71	0.54
1:D:243:GLU:HG2	1:D:249:LYS:HA	1.90	0.54
1:E:29:PRO:CD	1:F:28:LEU:HD22	2.38	0.54
1:E:31:TYR:OH	1:F:230:ASP:OD1	2.18	0.54
1:F:23:ILE:HG21	1:F:28:LEU:HD23	1.86	0.54
1:B:16:LEU:HD12	1:B:25:LYS:HD3	1.90	0.54
1:D:8:LEU:HG	2:D:3506:TTP:C2	2.43	0.54
1:G:23:ILE:HG12	1:G:27:LEU:HB2	1.90	0.53
1:F:2:LYS:NZ	1:F:50:GLU:OE1	2.29	0.53
1:E:179:ASP:C	1:E:179:ASP:OD1	2.49	0.53
1:B:290:GLU:OE2	1:D:169:ASN:ND2	2.41	0.53
1:C:14:THR:HA	1:C:17:HIS:ND1	2.23	0.53
1:F:8:LEU:HG	2:F:3510:TTP:C2	2.44	0.53
1:C:119:HIS:CD2	1:C:119:HIS:O	2.62	0.53
1:F:8:LEU:HG	2:F:3510:TTP:O2	2.08	0.53
1:H:38:TYR:HB2	1:H:39:PRO:HD3	1.89	0.53
1:F:23:ILE:HG23	1:F:28:LEU:CD2	2.32	0.52
1:F:273:ALA:N	1:F:274:PRO:HD2	2.24	0.52
1:A:273:ALA:HB3	1:A:274:PRO:CD	2.39	0.52
1:E:110:ASP:HB2	1:E:226:THR:OG1	2.10	0.52
1:B:101:ASN:O	1:B:180:GLN:NE2	2.43	0.52
1:D:249:LYS:HD2	1:D:283:TYR:CG	2.44	0.52
1:A:4:LYS:O	1:A:104:SER:HA	2.10	0.52
1:C:112:LEU:C	1:C:112:LEU:HD23	2.34	0.52
1:D:137:TYR:CE2	1:D:223:TRP:HB3	2.45	0.52
1:G:23:ILE:CG2	1:G:28:LEU:CD2	2.88	0.52
1:D:22:ALA:O	1:D:23:ILE:HB	2.09	0.51
1:G:112:LEU:HD23	1:G:112:LEU:C	2.35	0.51
1:H:192:SER:HB2	1:H:193:PRO:HD2	1.92	0.51
1:H:137:TYR:CE2	1:H:223:TRP:HB3	2.46	0.51
1:E:18:PRO:O	1:E:19:ALA:C	2.51	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:F:35:MET:HE3	1:F:35:MET:HB2	1.92	0.51
1:F:110:ASP:HB2	1:F:226:THR:OG1	2.11	0.51
1:H:264:ASP:C	1:H:264:ASP:OD1	2.54	0.51
1:C:8:LEU:HG	2:C:3504:TTP:O2	2.11	0.51
1:D:23:ILE:HD11	1:D:62:ARG:HD3	1.91	0.50
1:A:273:ALA:HB3	1:A:274:PRO:HD3	1.93	0.50
1:A:192:SER:HB2	1:A:193:PRO:HD2	1.92	0.50
1:C:243:GLU:HG2	1:C:249:LYS:HA	1.92	0.50
1:H:23:ILE:CD1	1:H:62:ARG:HD3	2.35	0.50
1:B:38:TYR:HB2	1:B:39:PRO:HD3	1.93	0.50
1:F:38:TYR:HB2	1:F:39:PRO:HD3	1.93	0.50
1:C:56:THR:HB	1:C:57:PRO:HD2	1.93	0.50
1:D:272:ALA:O	1:D:273:ALA:C	2.55	0.50
1:E:69:ASP:OD1	1:E:71:SER:OG	2.18	0.50
1:A:118:PHE:CE2	1:A:122:LEU:HD11	2.47	0.50
1:D:23:ILE:CD1	1:D:62:ARG:HD3	2.41	0.50
1:H:8:LEU:HG	2:H:3514:TTP:O2	2.12	0.50
1:C:26:GLN:H	1:C:26:GLN:NE2	2.10	0.50
1:D:23:ILE:HG12	1:D:24:SER:N	2.27	0.50
1:G:255:GLU:O	1:G:259:ARG:HG3	2.12	0.50
1:C:242:LEU:O	1:C:246:GLN:HG3	2.12	0.49
1:F:60:THR:N	1:F:61:PRO:CD	2.75	0.49
1:D:60:THR:HB	1:D:61:PRO:HD3	1.94	0.49
1:E:23:ILE:HD11	1:E:27:LEU:CD1	2.42	0.49
1:F:16:LEU:HD12	1:F:25:LYS:HD3	1.95	0.49
1:F:35:MET:CE	1:F:35:MET:HG3	2.18	0.49
1:G:243:GLU:HG2	1:G:249:LYS:HA	1.93	0.49
1:E:56:THR:HB	1:E:57:PRO:HD2	1.94	0.49
1:H:23:ILE:CG1	1:H:24:SER:H	2.22	0.49
1:C:272:ALA:O	1:C:273:ALA:C	2.55	0.49
1:D:23:ILE:HG12	1:D:24:SER:H	1.78	0.49
1:D:25:LYS:NZ	1:D:110:ASP:OD2	2.40	0.49
1:B:8:LEU:HG	2:B:3502:TTP:C2	2.47	0.49
1:C:255:GLU:O	1:C:259:ARG:HG3	2.12	0.49
1:D:260:GLN:O	1:D:261:LYS:HB2	2.13	0.49
1:D:273:ALA:HB3	1:D:274:PRO:CD	2.42	0.49
1:C:23:ILE:HG12	1:C:27:LEU:HB2	1.95	0.49
1:E:23:ILE:HG12	1:E:24:SER:N	2.28	0.49
1:D:16:LEU:HA	1:D:229:HIS:CE1	2.48	0.48
1:F:238:PHE:CE1	1:H:238:PHE:CE1	3.01	0.48
1:G:14:THR:O	1:G:16:LEU:N	2.46	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:H:255:GLU:OE1	1:H:283:TYR:OH	2.25	0.48
1:F:4:LYS:O	1:F:104:SER:HA	2.13	0.48
1:C:8:LEU:HG	2:C:3504:TTP:C2	2.47	0.48
1:D:38:TYR:HB2	1:D:39:PRO:HD3	1.94	0.48
1:H:117:ASP:O	1:H:118:PHE:C	2.55	0.48
1:A:273:ALA:N	1:A:274:PRO:HD2	2.29	0.48
1:A:25:LYS:HE3	1:A:26:GLN:HE22	1.79	0.48
1:G:59:ASP:OD1	1:G:62:ARG:NH1	2.44	0.48
1:G:216:ILE:HG22	1:G:217:MET:N	2.26	0.48
1:C:24:SER:HB2	1:C:59:ASP:OD2	2.14	0.48
1:E:111:ASN:N	1:E:111:ASN:HD22	2.10	0.48
1:D:81:VAL:HG12	1:D:82:GLN:N	2.28	0.48
1:G:14:THR:C	1:G:16:LEU:N	2.69	0.48
1:A:25:LYS:HE3	1:A:26:GLN:NE2	2.28	0.47
1:D:31:TYR:CD1	1:D:240:ALA:HB2	2.50	0.47
1:C:8:LEU:HD23	1:C:88:LEU:HD22	1.96	0.47
1:G:8:LEU:HG	2:G:3512:TTP:C2	2.49	0.47
1:G:90:GLN:O	1:G:91:ALA:C	2.57	0.47
1:B:120:GLU:N	1:B:120:GLU:OE1	2.47	0.47
1:C:27:LEU:HD21	1:C:63:PHE:CE2	2.50	0.47
1:C:60:THR:HB	1:C:61:PRO:HD3	1.96	0.47
1:D:249:LYS:HD2	1:D:283:TYR:CD2	2.49	0.47
1:F:273:ALA:HB3	1:F:274:PRO:HD3	1.95	0.47
1:H:31:TYR:CD1	1:H:240:ALA:HB2	2.49	0.47
1:B:237:GLN:HG2	1:D:237:GLN:HG2	1.97	0.47
1:G:23:ILE:CG2	1:G:28:LEU:HD23	2.45	0.47
1:H:260:GLN:O	1:H:261:LYS:HB2	2.15	0.47
1:A:56:THR:HB	1:A:57:PRO:HD2	1.97	0.47
1:B:58:GLN:CD	1:B:58:GLN:H	2.22	0.46
1:B:111:ASN:N	1:B:111:ASN:HD22	2.11	0.46
1:E:112:LEU:C	1:E:112:LEU:HD23	2.40	0.46
1:A:60:THR:HB	1:A:61:PRO:HD3	1.98	0.46
1:C:14:THR:O	1:C:16:LEU:N	2.48	0.46
1:D:82:GLN:HG2	1:D:84:SER:O	2.14	0.46
1:G:14:THR:HG22	1:G:17:HIS:HE1	1.79	0.46
1:B:241:THR:HA	1:D:234:GLU:OE1	2.15	0.46
1:F:110:ASP:C	1:F:110:ASP:OD1	2.58	0.46
1:G:81:VAL:HG12	1:G:82:GLN:N	2.31	0.46
1:G:260:GLN:O	1:G:261:LYS:CB	2.62	0.46
1:C:264:ASP:C	1:C:264:ASP:OD1	2.58	0.46
1:D:260:GLN:O	1:D:261:LYS:CB	2.61	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:G:23:ILE:CG2	1:G:28:LEU:HD21	2.46	0.46
1:H:272:ALA:O	1:H:273:ALA:C	2.59	0.46
1:D:16:LEU:N	1:D:16:LEU:HD23	2.27	0.46
1:A:230:ASP:OD1	1:B:31:TYR:OH	2.29	0.45
1:A:255:GLU:O	1:A:259:ARG:HG3	2.17	0.45
1:F:268:LEU:O	1:F:269:GLU:C	2.58	0.45
1:G:8:LEU:HD23	1:G:88:LEU:HD22	1.98	0.45
1:F:255:GLU:OE1	1:F:283:TYR:OH	2.14	0.45
1:H:67:LEU:HD23	1:H:67:LEU:HA	1.70	0.45
1:A:21:LEU:HD23	1:A:21:LEU:HA	1.83	0.45
1:G:8:LEU:HG	2:G:3512:TTP:O2	2.15	0.45
1:C:14:THR:C	1:C:16:LEU:N	2.72	0.45
1:C:14:THR:HA	1:C:17:HIS:CE1	2.52	0.45
1:E:199:ILE:CG2	1:E:200:THR:N	2.78	0.45
1:F:111:ASN:HD22	1:F:111:ASN:N	2.13	0.45
1:H:16:LEU:O	1:H:17:HIS:C	2.57	0.45
1:D:8:LEU:HD12	1:D:8:LEU:HA	1.75	0.45
1:F:173:THR:HB	1:F:223:TRP:CE2	2.51	0.45
1:H:260:GLN:O	1:H:261:LYS:CB	2.64	0.45
1:A:120:GLU:N	1:A:120:GLU:OE1	2.50	0.45
1:A:260:GLN:O	1:A:261:LYS:CB	2.65	0.45
1:D:117:ASP:O	1:D:118:PHE:C	2.59	0.45
1:D:273:ALA:HB3	1:D:274:PRO:HD3	1.98	0.45
1:C:273:ALA:HB3	1:C:274:PRO:CD	2.47	0.45
1:E:32:ASP:OD2	1:E:243:GLU:OE1	2.34	0.44
1:E:34:PRO:O	1:E:35:MET:C	2.59	0.44
1:H:8:LEU:HD23	1:H:88:LEU:HD22	1.99	0.44
1:H:228:THR:O	1:H:229:HIS:C	2.57	0.44
1:H:90:GLN:O	1:H:91:ALA:C	2.60	0.44
1:H:204:ARG:HH11	1:H:204:ARG:HD2	1.63	0.44
1:E:127:GLN:O	1:E:128:ARG:C	2.59	0.44
1:F:120:GLU:OE1	1:F:120:GLU:N	2.51	0.44
1:A:145:TYR:OH	1:A:225:ASP:OD2	2.28	0.44
1:C:117:ASP:O	1:C:118:PHE:C	2.58	0.44
1:F:184:ASP:HA	1:F:187:ARG:HG3	2.00	0.44
1:G:260:GLN:O	1:G:261:LYS:HB2	2.17	0.44
1:G:272:ALA:O	1:G:273:ALA:C	2.61	0.44
1:F:14:THR:C	1:F:16:LEU:N	2.75	0.44
1:A:54:ILE:HA	1:A:80:ALA:O	2.18	0.44
1:C:27:LEU:HD21	1:C:63:PHE:CD2	2.53	0.44
1:C:58:GLN:HE21	1:C:62:ARG:HH12	1.66	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:G:228:THR:O	1:G:229:HIS:C	2.59	0.44
1:C:120:GLU:N	1:C:120:GLU:OE1	2.51	0.44
1:G:192:SER:O	1:G:195:GLY:N	2.44	0.44
1:B:83:PRO:C	1:B:84:SER:HG	2.23	0.43
1:F:60:THR:O	1:F:61:PRO:C	2.61	0.43
1:C:58:GLN:HE21	1:C:62:ARG:NH2	2.13	0.43
1:D:56:THR:HB	1:D:57:PRO:HD2	2.00	0.43
1:G:255:GLU:OE1	1:G:283:TYR:OH	2.31	0.43
1:A:14:THR:N	2:A:3500:TTP:O2G	2.52	0.43
1:A:249:LYS:HD2	1:A:283:TYR:CD2	2.53	0.43
1:D:151:ASP:OD1	1:D:151:ASP:C	2.61	0.43
1:E:19:ALA:HA	1:F:34:PRO:HG3	1.99	0.43
1:D:118:PHE:CE2	1:D:122:LEU:HD11	2.54	0.43
1:H:15:ARG:HG3	2:H:3514:TTP:O1G	2.19	0.43
1:E:50:GLU:C	1:E:51:ILE:HG13	2.43	0.43
1:B:41:SER:HB2	1:B:256:ILE:CD1	2.49	0.43
1:B:56:THR:HB	1:B:57:PRO:HD2	2.00	0.43
1:C:67:LEU:HA	1:C:67:LEU:HD23	1.76	0.43
1:E:192:SER:HB2	1:E:193:PRO:CD	2.45	0.43
1:B:127:GLN:O	1:B:128:ARG:C	2.57	0.43
1:C:58:GLN:NE2	1:C:62:ARG:HH12	2.17	0.43
1:F:32:ASP:OD2	1:F:243:GLU:OE1	2.36	0.43
1:B:83:PRO:C	1:B:84:SER:OG	2.62	0.42
1:G:4:LYS:O	1:G:104:SER:HA	2.19	0.42
1:G:60:THR:N	1:G:61:PRO:CD	2.82	0.42
1:B:16:LEU:O	1:B:17:HIS:C	2.61	0.42
1:C:4:LYS:O	1:C:104:SER:HA	2.20	0.42
1:B:32:ASP:OD2	1:B:243:GLU:OE1	2.37	0.42
1:C:137:TYR:CE2	1:C:223:TRP:HB3	2.54	0.42
1:B:26:GLN:H	1:B:26:GLN:NE2	2.18	0.42
1:C:2:LYS:O	1:C:2:LYS:HG3	2.20	0.42
1:C:17:HIS:CD2	1:C:21:LEU:CD2	3.02	0.42
1:E:118:PHE:CE2	1:E:122:LEU:HD11	2.54	0.42
1:F:118:PHE:CE2	1:F:122:LEU:HD11	2.54	0.42
1:A:23:ILE:HG21	1:B:23:ILE:HD12	2.02	0.42
1:A:268:LEU:O	1:A:269:GLU:C	2.63	0.42
1:D:137:TYR:CD2	1:D:223:TRP:HE3	2.38	0.42
1:B:14:THR:O	1:B:15:ARG:C	2.61	0.42
1:B:31:TYR:CD1	1:B:240:ALA:HB2	2.54	0.42
1:C:249:LYS:HD2	1:C:283:TYR:CD2	2.54	0.42
1:E:110:ASP:OD1	1:E:110:ASP:C	2.63	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:F:121:LEU:HD11	1:F:135:PHE:HE2	1.84	0.42
1:H:54:ILE:HA	1:H:80:ALA:O	2.19	0.42
1:A:260:GLN:O	1:A:261:LYS:HB2	2.18	0.42
1:E:199:ILE:HG23	1:E:200:THR:N	2.34	0.42
1:F:8:LEU:HD21	1:F:88:LEU:HA	2.01	0.42
1:G:23:ILE:HG21	1:G:28:LEU:HD23	1.99	0.42
1:H:249:LYS:HD2	1:H:283:TYR:CD2	2.54	0.42
1:C:218:GLY:C	1:C:220:GLY:N	2.76	0.42
1:F:28:LEU:HA	1:F:29:PRO:HD3	1.81	0.42
1:G:56:THR:HB	1:G:57:PRO:HD2	2.01	0.42
1:G:76:ASP:C	1:G:76:ASP:OD1	2.62	0.42
1:G:122:LEU:HD23	1:G:122:LEU:HA	1.79	0.42
1:H:242:LEU:O	1:H:246:GLN:HG3	2.19	0.42
1:A:27:LEU:HD23	1:A:27:LEU:HA	1.86	0.42
1:B:13:GLY:HA2	2:B:3502:TTP:O3B	2.19	0.42
1:H:218:GLY:C	1:H:220:GLY:N	2.78	0.42
1:A:127:GLN:O	1:A:128:ARG:C	2.57	0.42
1:C:88:LEU:HB2	1:C:199:ILE:HB	2.02	0.42
1:D:23:ILE:HD11	1:D:62:ARG:CD	2.49	0.42
1:E:273:ALA:N	1:E:274:PRO:CD	2.83	0.42
1:H:59:ASP:OD1	1:H:62:ARG:NH1	2.48	0.42
1:H:64:GLN:HA	1:H:79:TYR:CZ	2.55	0.42
1:B:238:PHE:CE1	1:D:238:PHE:CE1	3.08	0.41
1:E:4:LYS:O	1:E:104:SER:HA	2.20	0.41
1:F:116:HIS:O	1:F:117:ASP:HB2	2.19	0.41
1:B:2:LYS:O	1:B:2:LYS:HG3	2.16	0.41
1:B:55:SER:OG	1:B:56:THR:N	2.54	0.41
1:B:192:SER:O	1:B:195:GLY:N	2.47	0.41
1:D:25:LYS:HE3	1:D:26:GLN:NE2	2.35	0.41
1:F:35:MET:CG	1:F:35:MET:HE2	2.04	0.41
1:B:59:ASP:O	1:B:60:THR:C	2.62	0.41
1:C:8:LEU:HD23	1:C:88:LEU:CD2	2.50	0.41
1:C:90:GLN:O	1:C:91:ALA:C	2.63	0.41
1:F:137:TYR:CE2	1:F:223:TRP:HB3	2.55	0.41
1:F:243:GLU:HG2	1:F:249:LYS:HA	2.00	0.41
1:G:268:LEU:O	1:G:269:GLU:C	2.62	0.41
1:B:60:THR:N	1:B:61:PRO:CD	2.83	0.41
1:D:64:GLN:HA	1:D:79:TYR:CZ	2.55	0.41
1:E:58:GLN:CD	1:E:58:GLN:H	2.28	0.41
1:C:15:ARG:NE	2:C:3504:TTP:O1G	2.41	0.41
1:C:162:LYS:N	1:C:163:PRO:CD	2.83	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:C:193:PRO:C	1:C:195:GLY:N	2.78	0.41
1:E:8:LEU:HD21	1:E:88:LEU:HA	2.02	0.41
1:E:21:LEU:HD23	1:E:21:LEU:HA	1.89	0.41
1:F:31:TYR:CD1	1:F:240:ALA:HB2	2.56	0.41
1:G:273:ALA:N	1:G:274:PRO:HD2	2.35	0.41
1:E:228:THR:O	1:E:229:HIS:C	2.61	0.41
1:E:268:LEU:O	1:E:269:GLU:C	2.61	0.41
1:E:272:ALA:O	1:E:273:ALA:C	2.61	0.41
1:H:28:LEU:HA	1:H:29:PRO:HD3	1.85	0.41
1:H:35:MET:SD	1:H:110:ASP:HA	2.60	0.41
1:A:55:SER:OG	1:A:56:THR:N	2.53	0.41
1:C:280:TYR:CG	1:D:18:PRO:HD3	2.56	0.41
1:G:218:GLY:C	1:G:220:GLY:N	2.78	0.41
1:H:199:ILE:HD12	1:H:199:ILE:HA	1.92	0.41
1:C:27:LEU:HD23	1:C:27:LEU:HA	1.93	0.41
1:D:17:HIS:NE2	1:D:21:LEU:HD23	2.36	0.41
1:D:32:ASP:OD2	1:D:243:GLU:OE1	2.38	0.41
1:E:60:THR:HB	1:E:61:PRO:HD3	2.03	0.41
1:G:24:SER:CB	1:G:59:ASP:OD2	2.63	0.41
1:A:8:LEU:HD21	1:A:88:LEU:HA	2.02	0.41
1:A:24:SER:O	1:A:25:LYS:C	2.63	0.41
1:B:199:ILE:CG2	1:B:200:THR:N	2.83	0.41
1:E:23:ILE:HD11	1:E:27:LEU:HD13	2.02	0.41
1:E:25:LYS:HE3	1:E:26:GLN:HE22	1.85	0.41
1:F:35:MET:SD	1:F:110:ASP:HA	2.61	0.41
1:H:67:LEU:HB2	1:H:79:TYR:OH	2.21	0.41
1:A:32:ASP:OD2	1:A:243:GLU:OE1	2.37	0.40
1:H:287:LEU:HD23	1:H:287:LEU:HA	1.87	0.40
1:A:249:LYS:HD2	1:A:283:TYR:CG	2.55	0.40
1:B:23:ILE:O	1:B:24:SER:C	2.64	0.40
1:B:116:HIS:O	1:B:117:ASP:HB2	2.20	0.40
1:C:260:GLN:O	1:C:261:LYS:CB	2.67	0.40
1:E:90:GLN:O	1:E:91:ALA:C	2.64	0.40
1:F:239:ILE:HD13	1:F:239:ILE:HA	1.82	0.40
1:G:117:ASP:O	1:G:118:PHE:C	2.63	0.40
1:B:233:LEU:HD12	1:B:233:LEU:HA	1.76	0.40
1:D:16:LEU:O	1:D:229:HIS:HE1	2.04	0.40
1:D:28:LEU:HA	1:D:29:PRO:HD3	1.84	0.40
1:G:35:MET:SD	1:G:110:ASP:HA	2.61	0.40
1:H:27:LEU:HD23	1:H:27:LEU:HA	1.80	0.40
1:H:31:TYR:CE1	1:H:240:ALA:HB2	2.56	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:D:3506:TTP:H2'2	2:D:3506:TTP:O1B	2.22	0.40
1:G:54:ILE:HD13	1:G:54:ILE:HG21	1.88	0.40
1:A:251:ALA:O	1:A:253:PRO:HD3	2.22	0.40
1:H:223:TRP:C	1:H:224:LEU:HD23	2.46	0.40

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:E:127:GLN:OE1	1:H:167:LYS:NZ[2_647]	2.19	0.01

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	290/293 (99%)	285 (98%)	4 (1%)	1 (0%)	36	58
1	B	290/293 (99%)	282 (97%)	7 (2%)	1 (0%)	36	58
1	C	290/293 (99%)	280 (97%)	9 (3%)	1 (0%)	36	58
1	D	290/293 (99%)	283 (98%)	5 (2%)	2 (1%)	18	38
1	E	290/293 (99%)	282 (97%)	7 (2%)	1 (0%)	36	58
1	F	290/293 (99%)	284 (98%)	5 (2%)	1 (0%)	36	58
1	G	290/293 (99%)	281 (97%)	8 (3%)	1 (0%)	36	58
1	H	290/293 (99%)	283 (98%)	5 (2%)	2 (1%)	18	38
All	All	2320/2344 (99%)	2260 (97%)	50 (2%)	10 (0%)	30	51

All (10) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	D	23	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	C	31	TYR
1	A	31	TYR
1	B	31	TYR
1	D	31	TYR
1	E	31	TYR
1	F	31	TYR
1	G	31	TYR
1	H	31	TYR
1	H	23	ILE

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	239/240 (100%)	234 (98%)	5 (2%)	47	73
1	B	239/240 (100%)	233 (98%)	6 (2%)	42	69
1	C	239/240 (100%)	226 (95%)	13 (5%)	20	42
1	D	239/240 (100%)	228 (95%)	11 (5%)	24	49
1	E	239/240 (100%)	229 (96%)	10 (4%)	26	52
1	F	239/240 (100%)	232 (97%)	7 (3%)	37	65
1	G	239/240 (100%)	228 (95%)	11 (5%)	24	49
1	H	239/240 (100%)	232 (97%)	7 (3%)	37	65
All	All	1912/1920 (100%)	1842 (96%)	70 (4%)	30	57

All (70) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	12	SER
1	A	60	THR
1	A	209	ARG
1	A	225	ASP
1	A	252	CYS
1	B	24	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	B	26	GLN
1	B	119	HIS
1	B	225	ASP
1	B	252	CYS
1	B	267	GLN
1	C	20	THR
1	C	24	SER
1	C	26	GLN
1	C	119	HIS
1	C	120	GLU
1	C	126	SER
1	C	130	THR
1	C	148	VAL
1	C	164	LEU
1	C	225	ASP
1	C	252	CYS
1	C	260	GLN
1	C	267	GLN
1	D	12	SER
1	D	20	THR
1	D	60	THR
1	D	119	HIS
1	D	126	SER
1	D	148	VAL
1	D	164	LEU
1	D	209	ARG
1	D	225	ASP
1	D	252	CYS
1	D	267	GLN
1	E	12	SER
1	E	24	SER
1	E	60	THR
1	E	117	ASP
1	E	119	HIS
1	E	126	SER
1	E	209	ARG
1	E	225	ASP
1	E	252	CYS
1	E	267	GLN
1	F	24	SER
1	F	60	THR
1	F	119	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	F	225	ASP
1	F	252	CYS
1	F	261	LYS
1	F	267	GLN
1	G	12	SER
1	G	20	THR
1	G	26	GLN
1	G	60	THR
1	G	119	HIS
1	G	126	SER
1	G	130	THR
1	G	148	VAL
1	G	225	ASP
1	G	252	CYS
1	G	267	GLN
1	H	12	SER
1	H	20	THR
1	H	119	HIS
1	H	164	LEU
1	H	225	ASP
1	H	241	THR
1	H	252	CYS

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (29) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	26	GLN
1	A	111	ASN
1	A	181	GLN
1	B	17	HIS
1	B	26	GLN
1	B	64	GLN
1	B	111	ASN
1	B	180	GLN
1	B	181	GLN
1	B	237	GLN
1	C	17	HIS
1	C	26	GLN
1	C	58	GLN
1	C	119	HIS
1	D	26	GLN
1	D	119	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	D	229	HIS
1	E	26	GLN
1	E	111	ASN
1	E	119	HIS
1	F	17	HIS
1	F	111	ASN
1	F	229	HIS
1	F	237	GLN
1	G	17	HIS
1	G	119	HIS
1	G	181	GLN
1	H	26	GLN
1	H	119	HIS

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 oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

16 ligands are modelled in this entry.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds (or angles) for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds (or angles) that are observed in the model and the number of bonds (or angles) that are defined in the Chemical Component Dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	$\# Z > 2$	Counts	RMSZ	$\# Z > 2$
2	TTP	E	3508	-	29,30,30	2.48	12 (41%)	43,47,47	2.48	16 (37%)

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
2	TTP	D	3507	-	29,30,30	2.67	11 (37%)	43,47,47	2.97	15 (34%)
2	TTP	H	3515	-	29,30,30	2.66	13 (44%)	43,47,47	2.17	13 (30%)
2	TTP	H	3514	-	29,30,30	2.55	12 (41%)	43,47,47	2.92	19 (44%)
2	TTP	F	3511	-	29,30,30	2.71	12 (41%)	43,47,47	3.16	16 (37%)
2	TTP	G	3512	-	29,30,30	2.90	12 (41%)	43,47,47	2.10	14 (32%)
2	TTP	G	3513	-	29,30,30	2.76	12 (41%)	43,47,47	3.46	14 (32%)
2	TTP	F	3510	-	29,30,30	2.62	11 (37%)	43,47,47	3.19	18 (41%)
2	TTP	C	3504	-	29,30,30	2.65	12 (41%)	43,47,47	2.69	17 (39%)
2	TTP	D	3506	-	29,30,30	2.78	12 (41%)	43,47,47	2.65	17 (39%)
2	TTP	B	3503	-	29,30,30	2.80	12 (41%)	43,47,47	2.15	14 (32%)
2	TTP	B	3502	-	29,30,30	3.03	16 (55%)	43,47,47	1.98	12 (27%)
2	TTP	A	3501	-	29,30,30	2.46	10 (34%)	43,47,47	2.54	18 (41%)
2	TTP	C	3505	-	29,30,30	2.87	15 (51%)	43,47,47	1.91	11 (25%)
2	TTP	E	3509	-	29,30,30	2.51	11 (37%)	43,47,47	2.61	17 (39%)
2	TTP	A	3500	-	29,30,30	2.73	12 (41%)	43,47,47	2.69	15 (34%)

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	TTP	E	3508	-	-	5/22/34/34	0/2/2/2
2	TTP	D	3507	-	-	7/22/34/34	0/2/2/2
2	TTP	H	3515	-	-	8/22/34/34	0/2/2/2
2	TTP	H	3514	-	-	4/22/34/34	0/2/2/2
2	TTP	F	3511	-	-	4/22/34/34	0/2/2/2
2	TTP	G	3512	-	-	5/22/34/34	0/2/2/2
2	TTP	G	3513	-	-	2/22/34/34	0/2/2/2
2	TTP	F	3510	-	-	6/22/34/34	0/2/2/2
2	TTP	C	3504	-	-	6/22/34/34	0/2/2/2
2	TTP	D	3506	-	-	3/22/34/34	0/2/2/2
2	TTP	B	3503	-	-	2/22/34/34	0/2/2/2
2	TTP	B	3502	-	-	3/22/34/34	0/2/2/2
2	TTP	A	3501	-	-	1/22/34/34	0/2/2/2
2	TTP	C	3505	-	-	4/22/34/34	0/2/2/2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	TTP	E	3509	-	-	0/22/34/34	0/2/2/2
2	TTP	A	3500	-	-	5/22/34/34	0/2/2/2

All (195) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	C	3505	TTP	C3'-C4'	-6.28	1.36	1.53
2	F	3510	TTP	C3'-C4'	-6.13	1.36	1.53
2	F	3511	TTP	C3'-C4'	-6.03	1.37	1.53
2	D	3507	TTP	C3'-C4'	-5.86	1.37	1.53
2	B	3502	TTP	C4-C5	-5.83	1.35	1.44
2	B	3503	TTP	C3'-C4'	-5.80	1.37	1.53
2	B	3502	TTP	C1'-N1	-5.75	1.33	1.48
2	C	3505	TTP	C2'-C3'	-5.62	1.38	1.52
2	B	3503	TTP	C2'-C1'	-5.55	1.37	1.52
2	A	3500	TTP	C3'-C4'	-5.53	1.38	1.53
2	D	3506	TTP	C4-C5	-5.53	1.35	1.44
2	G	3513	TTP	C6-C5	5.51	1.43	1.34
2	D	3506	TTP	C3'-C4'	-5.49	1.38	1.53
2	G	3513	TTP	C3'-C4'	-5.45	1.38	1.53
2	A	3500	TTP	C6-N1	-5.45	1.28	1.38
2	B	3503	TTP	C1'-N1	-5.45	1.34	1.48
2	C	3505	TTP	C2'-C1'	-5.37	1.37	1.52
2	H	3515	TTP	C3'-C4'	-5.34	1.38	1.53
2	G	3513	TTP	C4-C5	-5.29	1.36	1.44
2	A	3501	TTP	C2'-C1'	-5.29	1.38	1.52
2	G	3512	TTP	PA-O3A	5.27	1.65	1.59
2	A	3501	TTP	C3'-C4'	-5.22	1.39	1.53
2	F	3511	TTP	C2'-C1'	-5.22	1.38	1.52
2	F	3511	TTP	C4-C5	-5.18	1.36	1.44
2	A	3500	TTP	C2'-C1'	-5.14	1.38	1.52
2	D	3506	TTP	PA-O3A	5.08	1.65	1.59
2	G	3512	TTP	C2'-C3'	-5.07	1.40	1.52
2	H	3514	TTP	C2'-C3'	-5.07	1.40	1.52
2	C	3504	TTP	PA-O3A	5.06	1.65	1.59
2	D	3507	TTP	C2-N1	-5.05	1.30	1.38
2	H	3514	TTP	C4-C5	-5.03	1.36	1.44
2	B	3502	TTP	C3'-C4'	-5.02	1.39	1.53
2	E	3509	TTP	C2'-C1'	-4.99	1.38	1.52
2	G	3513	TTP	C2'-C3'	-4.96	1.40	1.52
2	C	3504	TTP	C2'-C3'	-4.95	1.40	1.52
2	G	3512	TTP	C1'-N1	-4.93	1.35	1.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	A	3501	TTP	C1'-N1	-4.93	1.35	1.48
2	D	3507	TTP	C2'-C1'	-4.92	1.39	1.52
2	G	3512	TTP	C6-N1	-4.91	1.29	1.38
2	H	3515	TTP	C6-C5	4.90	1.42	1.34
2	E	3509	TTP	C3'-C4'	-4.86	1.40	1.53
2	E	3508	TTP	C2'-C1'	-4.82	1.39	1.52
2	F	3511	TTP	C2'-C3'	-4.82	1.40	1.52
2	F	3510	TTP	C2'-C1'	-4.81	1.39	1.52
2	B	3502	TTP	C6-N1	-4.80	1.29	1.38
2	G	3512	TTP	C2'-C1'	-4.79	1.39	1.52
2	B	3503	TTP	C2'-C3'	-4.72	1.40	1.52
2	H	3515	TTP	C2'-C1'	-4.71	1.39	1.52
2	D	3506	TTP	C2'-C3'	-4.70	1.40	1.52
2	A	3500	TTP	C2'-C3'	-4.70	1.40	1.52
2	A	3500	TTP	C1'-N1	-4.69	1.36	1.48
2	H	3515	TTP	C2'-C3'	-4.66	1.41	1.52
2	D	3506	TTP	C2'-C1'	-4.59	1.39	1.52
2	B	3502	TTP	C2'-C1'	-4.57	1.40	1.52
2	E	3509	TTP	C1'-N1	-4.55	1.36	1.48
2	H	3514	TTP	C6-N1	-4.54	1.30	1.38
2	E	3508	TTP	C1'-N1	-4.51	1.36	1.48
2	C	3504	TTP	C2'-C1'	-4.49	1.40	1.52
2	F	3510	TTP	C6-N1	-4.49	1.30	1.38
2	D	3506	TTP	C1'-N1	-4.49	1.36	1.48
2	F	3510	TTP	C1'-N1	-4.43	1.36	1.48
2	E	3508	TTP	C3'-C4'	-4.43	1.41	1.53
2	C	3504	TTP	C6-N1	-4.38	1.30	1.38
2	B	3503	TTP	C6-N1	-4.35	1.30	1.38
2	B	3502	TTP	C2-N1	-4.34	1.31	1.38
2	C	3505	TTP	C6-C5	4.33	1.41	1.34
2	F	3511	TTP	C6-C5	4.32	1.41	1.34
2	D	3507	TTP	C2'-C3'	-4.32	1.41	1.52
2	G	3513	TTP	C2'-C1'	-4.32	1.40	1.52
2	C	3504	TTP	C3'-C4'	-4.29	1.41	1.53
2	E	3508	TTP	C2'-C3'	-4.29	1.42	1.52
2	E	3509	TTP	C2'-C3'	-4.28	1.42	1.52
2	G	3512	TTP	PB-O3A	4.25	1.64	1.59
2	G	3513	TTP	C1'-N1	-4.21	1.37	1.48
2	G	3512	TTP	C4-C5	-4.19	1.38	1.44
2	G	3512	TTP	C3'-C4'	-4.17	1.42	1.53
2	A	3501	TTP	C6-N1	-4.17	1.30	1.38
2	B	3502	TTP	C5'-C4'	-4.16	1.39	1.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	A	3501	TTP	C2'-C3'	-4.10	1.42	1.52
2	H	3514	TTP	C2'-C1'	-4.08	1.41	1.52
2	D	3506	TTP	C6-N1	-4.07	1.31	1.38
2	A	3500	TTP	C4-C5	-4.06	1.38	1.44
2	B	3503	TTP	C6-C5	4.04	1.41	1.34
2	G	3513	TTP	C2-N3	-4.04	1.30	1.38
2	H	3515	TTP	C1'-N1	-4.03	1.37	1.48
2	E	3508	TTP	C4-C5	-4.02	1.38	1.44
2	F	3510	TTP	C2'-C3'	-4.02	1.42	1.52
2	H	3514	TTP	C3'-C4'	-4.02	1.42	1.53
2	H	3514	TTP	C1'-N1	-4.00	1.38	1.48
2	B	3502	TTP	C2'-C3'	-3.99	1.42	1.52
2	G	3512	TTP	C6-C5	3.96	1.41	1.34
2	C	3504	TTP	C1'-N1	-3.94	1.38	1.48
2	B	3503	TTP	C5'-C4'	-3.94	1.39	1.51
2	D	3507	TTP	C2-N3	-3.88	1.31	1.38
2	C	3504	TTP	C6-C5	3.86	1.40	1.34
2	H	3515	TTP	C2-N1	-3.86	1.32	1.38
2	C	3505	TTP	C1'-N1	-3.83	1.38	1.48
2	E	3508	TTP	C6-N1	-3.83	1.31	1.38
2	F	3510	TTP	C5'-C4'	-3.82	1.40	1.51
2	D	3507	TTP	C1'-N1	-3.82	1.38	1.48
2	F	3511	TTP	C1'-N1	-3.78	1.38	1.48
2	E	3509	TTP	C6-C5	3.76	1.40	1.34
2	E	3509	TTP	PB-O3B	3.76	1.63	1.59
2	D	3507	TTP	C5'-C4'	-3.74	1.40	1.51
2	D	3507	TTP	C6-C5	3.73	1.40	1.34
2	H	3514	TTP	C5'-C4'	-3.71	1.40	1.51
2	G	3512	TTP	PB-O3B	-3.66	1.55	1.59
2	D	3506	TTP	C5'-C4'	-3.66	1.40	1.51
2	H	3515	TTP	C5'-C4'	-3.66	1.40	1.51
2	C	3505	TTP	O4'-C4'	-3.66	1.36	1.45
2	C	3505	TTP	C2-N1	-3.64	1.32	1.38
2	A	3500	TTP	C5'-C4'	-3.57	1.40	1.51
2	H	3514	TTP	PA-O3A	3.55	1.63	1.59
2	D	3507	TTP	C4-C5	-3.54	1.39	1.44
2	B	3502	TTP	PA-O3A	3.51	1.63	1.59
2	A	3501	TTP	C6-C5	3.50	1.40	1.34
2	C	3505	TTP	C5'-C4'	-3.49	1.41	1.51
2	F	3510	TTP	C4-C5	-3.48	1.39	1.44
2	F	3510	TTP	C2-N1	-3.48	1.33	1.38
2	E	3508	TTP	C5'-C4'	-3.42	1.41	1.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	F	3510	TTP	C4-N3	-3.41	1.32	1.38
2	G	3513	TTP	C5'-C4'	-3.40	1.41	1.51
2	H	3515	TTP	C4-C5	-3.37	1.39	1.44
2	H	3515	TTP	O4'-C4'	-3.33	1.37	1.45
2	B	3503	TTP	C2-N1	-3.33	1.33	1.38
2	D	3507	TTP	O4'-C4'	-3.32	1.37	1.45
2	G	3513	TTP	C4-N3	-3.30	1.32	1.38
2	D	3506	TTP	C2-N1	-3.29	1.33	1.38
2	H	3515	TTP	O2-C2	-3.29	1.17	1.23
2	E	3509	TTP	C6-N1	-3.27	1.32	1.38
2	C	3504	TTP	C5'-C4'	-3.22	1.41	1.51
2	G	3512	TTP	C5'-C4'	-3.19	1.42	1.51
2	A	3501	TTP	C5'-C4'	-3.15	1.42	1.51
2	F	3511	TTP	PA-O3A	3.15	1.62	1.59
2	C	3505	TTP	C2-N3	-3.15	1.32	1.38
2	C	3505	TTP	PB-O3B	-3.14	1.56	1.59
2	F	3511	TTP	C5'-C4'	-3.12	1.42	1.51
2	G	3512	TTP	C2-N1	-3.10	1.33	1.38
2	B	3502	TTP	C6-C5	3.10	1.39	1.34
2	E	3509	TTP	C5'-C4'	-3.08	1.42	1.51
2	D	3506	TTP	PB-O3A	3.07	1.62	1.59
2	B	3502	TTP	PB-O3B	-3.06	1.56	1.59
2	B	3502	TTP	C2-N3	-2.96	1.32	1.38
2	C	3505	TTP	C6-N1	-2.96	1.33	1.38
2	B	3503	TTP	C4-C5	-2.94	1.40	1.44
2	A	3501	TTP	C4-C5	-2.93	1.40	1.44
2	A	3501	TTP	PB-O3B	-2.82	1.56	1.59
2	B	3503	TTP	PA-O3A	2.80	1.62	1.59
2	G	3513	TTP	C2-N1	-2.77	1.34	1.38
2	E	3509	TTP	C4-C5	-2.76	1.40	1.44
2	D	3506	TTP	C6-C5	2.76	1.39	1.34
2	G	3513	TTP	O4'-C4'	-2.74	1.38	1.45
2	H	3515	TTP	C2-N3	-2.72	1.33	1.38
2	C	3504	TTP	PG-O3G	-2.71	1.44	1.54
2	H	3515	TTP	C6-N1	-2.70	1.33	1.38
2	C	3504	TTP	C4-C5	-2.70	1.40	1.44
2	E	3508	TTP	C6-C5	2.67	1.39	1.34
2	B	3502	TTP	PB-O3A	2.66	1.62	1.59
2	C	3504	TTP	PB-O3B	-2.63	1.56	1.59
2	B	3502	TTP	PG-O3G	-2.63	1.45	1.54
2	A	3500	TTP	PG-O3G	-2.59	1.45	1.54
2	F	3510	TTP	C6-C5	2.59	1.38	1.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	E	3509	TTP	PA-O2A	-2.59	1.43	1.55
2	F	3511	TTP	PB-O2B	-2.55	1.43	1.55
2	F	3510	TTP	PG-O2G	-2.55	1.45	1.54
2	A	3500	TTP	PB-O3B	2.52	1.62	1.59
2	H	3514	TTP	O4'-C1'	2.49	1.47	1.42
2	B	3502	TTP	PG-O2G	-2.48	1.45	1.54
2	E	3508	TTP	PB-O2B	-2.47	1.43	1.55
2	E	3508	TTP	PA-O3A	2.47	1.62	1.59
2	B	3503	TTP	PA-O1A	-2.44	1.42	1.50
2	A	3500	TTP	C6-C5	2.39	1.38	1.34
2	F	3511	TTP	C2-N3	-2.37	1.33	1.38
2	C	3504	TTP	C2-N3	-2.35	1.33	1.38
2	E	3509	TTP	PB-O3A	-2.29	1.57	1.59
2	H	3515	TTP	PB-O2B	-2.27	1.44	1.55
2	F	3511	TTP	C4-N3	-2.27	1.34	1.38
2	B	3502	TTP	C4-N3	-2.26	1.34	1.38
2	H	3514	TTP	PG-O3G	-2.25	1.46	1.54
2	A	3500	TTP	C4-N3	-2.24	1.34	1.38
2	A	3501	TTP	PA-O2A	-2.23	1.45	1.55
2	C	3505	TTP	PB-O3A	2.22	1.61	1.59
2	D	3507	TTP	PB-O2B	-2.18	1.45	1.55
2	A	3500	TTP	C2-N1	-2.13	1.35	1.38
2	G	3513	TTP	PB-O3B	-2.13	1.57	1.59
2	E	3508	TTP	PG-O1G	-2.12	1.43	1.50
2	C	3505	TTP	C4-C5	-2.11	1.41	1.44
2	H	3514	TTP	C2-N1	-2.10	1.35	1.38
2	H	3514	TTP	C6-C5	2.09	1.38	1.34
2	C	3505	TTP	PA-O3A	2.06	1.61	1.59
2	D	3506	TTP	PG-O3G	-2.05	1.47	1.54
2	C	3505	TTP	O3'-C3'	-2.03	1.39	1.43
2	E	3508	TTP	C4-N3	-2.01	1.35	1.38
2	F	3511	TTP	C2-N1	-2.01	1.35	1.38
2	B	3503	TTP	PB-O2B	-2.01	1.46	1.55

All (246) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	G	3513	TTP	C5-C6-N1	-14.46	107.60	123.31
2	F	3511	TTP	C5-C6-N1	-12.35	109.90	123.31
2	D	3507	TTP	C5-C6-N1	-11.41	110.92	123.31
2	F	3510	TTP	C5-C6-N1	-10.39	112.03	123.31
2	H	3514	TTP	O4-C4-C5	-8.93	114.70	124.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	G	3513	TTP	C6-C5-C4	8.53	125.05	118.02
2	C	3504	TTP	C5-C6-N1	-8.06	114.56	123.31
2	G	3513	TTP	C6-N1-C2	7.78	129.05	121.30
2	D	3506	TTP	O4-C4-C5	-7.76	116.04	124.92
2	E	3509	TTP	C5-C6-N1	-7.71	114.94	123.31
2	F	3511	TTP	C6-C5-C4	7.34	124.07	118.02
2	F	3511	TTP	C6-N1-C2	7.08	128.36	121.30
2	H	3514	TTP	C4-N3-C2	-6.79	118.44	127.34
2	F	3510	TTP	C4-N3-C2	-6.72	118.53	127.34
2	D	3507	TTP	C6-N1-C2	6.64	127.91	121.30
2	A	3500	TTP	C4-N3-C2	-6.57	118.73	127.34
2	H	3514	TTP	C1'-N1-C6	-6.56	109.72	120.74
2	A	3501	TTP	C4-N3-C2	-6.48	118.84	127.34
2	E	3509	TTP	C4-N3-C2	-6.48	118.85	127.34
2	F	3510	TTP	C6-N1-C2	6.29	127.57	121.30
2	C	3504	TTP	C4-N3-C2	-6.23	119.17	127.34
2	E	3508	TTP	C5-C6-N1	-6.22	116.56	123.31
2	D	3506	TTP	C4-N3-C2	-6.13	119.31	127.34
2	A	3500	TTP	O2-C2-N1	-6.10	114.85	122.80
2	D	3507	TTP	C6-C5-C4	6.05	123.01	118.02
2	C	3504	TTP	C1'-N1-C6	-6.02	110.63	120.74
2	F	3510	TTP	C6-C5-C4	5.95	122.92	118.02
2	A	3500	TTP	C5-C6-N1	-5.95	116.85	123.31
2	E	3508	TTP	C4-N3-C2	-5.86	119.65	127.34
2	A	3500	TTP	O4-C4-C5	-5.85	118.22	124.92
2	A	3501	TTP	C5-C4-N3	5.83	120.39	115.32
2	B	3502	TTP	C1'-N1-C6	-5.79	111.02	120.74
2	F	3510	TTP	C1'-N1-C6	-5.79	111.02	120.74
2	G	3513	TTP	C1'-N1-C6	-5.72	111.14	120.74
2	D	3506	TTP	O2-C2-N1	-5.71	115.36	122.80
2	F	3510	TTP	O2-C2-N1	-5.54	115.58	122.80
2	F	3511	TTP	O4-C4-C5	-5.43	118.70	124.92
2	B	3502	TTP	O4-C4-C5	-5.42	118.71	124.92
2	H	3514	TTP	C5-C6-N1	-5.31	117.55	123.31
2	G	3512	TTP	O2-C2-N1	-5.28	115.92	122.80
2	A	3501	TTP	C1'-N1-C6	-5.15	112.10	120.74
2	H	3515	TTP	O4'-C1'-N1	5.08	116.88	107.86
2	G	3512	TTP	C4-N3-C2	-5.06	120.70	127.34
2	C	3505	TTP	N3-C2-N1	5.06	121.48	114.89
2	H	3515	TTP	N3-C2-N1	5.04	121.45	114.89
2	A	3501	TTP	C5-C6-N1	-4.99	117.89	123.31
2	A	3500	TTP	C1'-N1-C6	-4.94	112.44	120.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	B	3503	TTP	C4-N3-C2	-4.94	120.86	127.34
2	A	3501	TTP	O4-C4-C5	-4.93	119.28	124.92
2	E	3509	TTP	C6-C5-C4	4.89	122.05	118.02
2	D	3507	TTP	C4-N3-C2	-4.79	121.06	127.34
2	F	3511	TTP	C1'-N1-C6	-4.66	112.92	120.74
2	H	3515	TTP	C4-N3-C2	-4.65	121.25	127.34
2	G	3513	TTP	C5M-C5-C6	-4.65	116.56	122.85
2	F	3511	TTP	C4-N3-C2	-4.65	121.25	127.34
2	E	3509	TTP	C1'-N1-C6	-4.61	113.00	120.74
2	E	3509	TTP	N3-C2-N1	4.55	120.81	114.89
2	C	3505	TTP	C2'-C3'-C4'	4.54	112.02	102.80
2	B	3503	TTP	C5-C6-N1	-4.54	118.38	123.31
2	E	3508	TTP	C6-C5-C4	4.51	121.74	118.02
2	A	3500	TTP	N3-C2-N1	4.47	120.71	114.89
2	B	3503	TTP	C5-C4-N3	4.46	119.20	115.32
2	F	3510	TTP	C5-C4-N3	4.45	119.19	115.32
2	E	3508	TTP	C1'-N1-C6	-4.42	113.32	120.74
2	C	3504	TTP	C6-C5-C4	4.42	121.66	118.02
2	D	3507	TTP	C1'-N1-C6	-4.33	113.46	120.74
2	A	3500	TTP	C6-C5-C4	4.32	121.58	118.02
2	C	3504	TTP	C6-N1-C2	4.31	125.59	121.30
2	C	3504	TTP	N3-C2-N1	4.29	120.48	114.89
2	F	3511	TTP	C5-C4-N3	4.29	119.05	115.32
2	B	3503	TTP	O2B-PB-O3B	-4.29	95.68	107.27
2	D	3507	TTP	C2'-C3'-C4'	4.24	111.40	102.80
2	D	3506	TTP	N3-C2-N1	4.22	120.39	114.89
2	H	3514	TTP	C1'-N1-C2	4.22	125.90	117.66
2	E	3508	TTP	N3-C2-N1	4.20	120.36	114.89
2	H	3514	TTP	C6-C5-C4	4.18	121.46	118.02
2	C	3505	TTP	C5-C6-N1	-4.16	118.80	123.31
2	H	3515	TTP	C1'-N1-C6	-4.10	113.86	120.74
2	B	3502	TTP	C1'-N1-C2	4.04	125.57	117.66
2	C	3504	TTP	C5M-C5-C6	-4.04	117.38	122.85
2	D	3506	TTP	C1'-N1-C6	-4.02	113.99	120.74
2	B	3503	TTP	C1'-N1-C6	-4.01	114.01	120.74
2	A	3501	TTP	O2-C2-N1	-4.00	117.59	122.80
2	G	3512	TTP	N3-C2-N1	3.96	120.05	114.89
2	H	3514	TTP	N3-C2-N1	3.93	120.01	114.89
2	E	3509	TTP	O4'-C1'-N1	3.92	114.83	107.86
2	B	3503	TTP	O2B-PB-O3A	3.91	117.83	107.27
2	A	3501	TTP	C6-N1-C2	3.89	125.18	121.30
2	G	3513	TTP	C2'-C3'-C4'	3.88	110.68	102.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	E	3508	TTP	O2-C2-N1	-3.88	117.74	122.80
2	G	3513	TTP	C4-N3-C2	-3.87	122.26	127.34
2	H	3514	TTP	C5-C4-N3	3.86	118.68	115.32
2	G	3512	TTP	C1'-N1-C6	-3.84	114.29	120.74
2	G	3512	TTP	O3G-PG-O3B	3.84	117.52	104.64
2	D	3506	TTP	C5-C6-N1	-3.81	119.17	123.31
2	H	3515	TTP	C5-C4-N3	3.79	118.62	115.32
2	A	3500	TTP	C5-C4-N3	3.77	118.60	115.32
2	D	3506	TTP	O4'-C1'-N1	3.74	114.50	107.86
2	D	3507	TTP	O2-C2-N1	-3.72	117.95	122.80
2	D	3506	TTP	C5-C4-N3	3.70	118.54	115.32
2	G	3512	TTP	C5-C6-N1	-3.68	119.31	123.31
2	F	3510	TTP	N3-C2-N1	3.64	119.63	114.89
2	E	3509	TTP	O2-C2-N1	-3.62	118.09	122.80
2	E	3508	TTP	C5-C4-N3	3.62	118.47	115.32
2	E	3509	TTP	C6-N1-C2	3.61	124.90	121.30
2	H	3515	TTP	O2-C2-N1	-3.58	118.14	122.80
2	F	3510	TTP	C5M-C5-C6	-3.57	118.02	122.85
2	C	3504	TTP	O4'-C1'-N1	3.56	114.18	107.86
2	G	3513	TTP	O4'-C1'-N1	3.55	114.16	107.86
2	C	3504	TTP	C5-C4-N3	3.54	118.40	115.32
2	H	3515	TTP	C5-C6-N1	-3.52	119.48	123.31
2	E	3508	TTP	O3B-PB-O1B	-3.52	100.11	110.70
2	F	3510	TTP	O4-C4-C5	-3.52	120.89	124.92
2	H	3515	TTP	C1'-N1-C2	3.49	124.48	117.66
2	D	3507	TTP	N3-C2-N1	3.48	119.43	114.89
2	E	3508	TTP	C2'-C3'-C4'	3.43	109.76	102.80
2	H	3514	TTP	O4-C4-N3	3.43	126.56	120.11
2	H	3514	TTP	O4'-C1'-N1	3.42	113.93	107.86
2	F	3511	TTP	O4'-C1'-N1	3.41	113.92	107.86
2	G	3513	TTP	C5-C4-N3	3.41	118.28	115.32
2	D	3507	TTP	O4'-C1'-N1	3.40	113.90	107.86
2	B	3503	TTP	C6-N1-C2	3.38	124.67	121.30
2	E	3508	TTP	O4-C4-C5	-3.36	121.07	124.92
2	C	3505	TTP	C4-N3-C2	-3.34	122.96	127.34
2	E	3509	TTP	C5-C4-N3	3.29	118.18	115.32
2	C	3505	TTP	C1'-N1-C6	-3.25	115.28	120.74
2	G	3513	TTP	O5'-C5'-C4'	3.25	120.06	108.99
2	G	3512	TTP	O4'-C1'-N1	3.22	113.57	107.86
2	C	3505	TTP	O4'-C1'-N1	3.20	113.55	107.86
2	A	3501	TTP	O4'-C1'-N1	3.15	113.46	107.86
2	H	3515	TTP	O2B-PB-O1B	3.15	127.12	112.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	E	3509	TTP	O5'-C5'-C4'	3.13	119.64	108.99
2	H	3514	TTP	C2'-C3'-C4'	3.11	109.10	102.80
2	C	3504	TTP	C2'-C3'-C4'	3.09	109.08	102.80
2	H	3515	TTP	C2'-C3'-C4'	3.08	109.05	102.80
2	H	3514	TTP	O2-C2-N1	-3.08	118.79	122.80
2	A	3501	TTP	O4'-C4'-C5'	3.03	119.03	109.33
2	C	3504	TTP	C1'-N1-C2	3.02	123.57	117.66
2	A	3500	TTP	C1'-N1-C2	3.02	123.56	117.66
2	D	3506	TTP	C6-C5-C4	3.00	120.49	118.02
2	D	3506	TTP	O3'-C3'-C4'	-3.00	98.71	110.07
2	B	3502	TTP	O3B-PB-O1B	-2.98	101.75	110.70
2	B	3502	TTP	C5-C6-N1	-2.97	120.08	123.31
2	F	3511	TTP	O5'-C5'-C4'	2.95	119.05	108.99
2	B	3502	TTP	C4-N3-C2	-2.94	123.49	127.34
2	E	3508	TTP	O3G-PG-O3B	2.92	114.44	104.64
2	C	3505	TTP	O5'-C5'-C4'	2.91	118.90	108.99
2	G	3513	TTP	O2B-PB-O1B	2.90	125.92	112.44
2	F	3511	TTP	O2A-PA-O3A	2.86	115.02	107.27
2	A	3501	TTP	N3-C2-N1	2.85	118.60	114.89
2	G	3512	TTP	C2'-C3'-C4'	2.85	108.58	102.80
2	F	3510	TTP	O3G-PG-O2G	2.84	118.45	107.80
2	A	3500	TTP	O3B-PB-O1B	-2.80	102.28	110.70
2	D	3506	TTP	O4-C4-N3	2.80	125.38	120.11
2	D	3506	TTP	C1'-N1-C2	2.80	123.13	117.66
2	E	3508	TTP	C1'-N1-C2	2.79	123.12	117.66
2	C	3505	TTP	C1'-N1-C2	2.78	123.10	117.66
2	D	3506	TTP	O3A-PB-O1B	-2.78	102.34	110.70
2	A	3501	TTP	C2'-C3'-C4'	2.78	108.43	102.80
2	B	3503	TTP	N3-C2-N1	2.75	118.47	114.89
2	H	3514	TTP	O3G-PG-O2G	2.71	117.97	107.80
2	B	3503	TTP	O4'-C1'-N1	2.70	112.66	107.86
2	A	3500	TTP	O4'-C1'-C2'	-2.70	101.20	106.25
2	A	3500	TTP	O2B-PB-O1B	2.69	124.95	112.44
2	B	3503	TTP	O4-C4-C5	-2.69	121.84	124.92
2	D	3507	TTP	O2B-PB-O1B	2.68	124.91	112.44
2	B	3502	TTP	O2B-PB-O3A	2.66	114.47	107.27
2	D	3507	TTP	O2B-PB-O3A	-2.66	100.09	107.27
2	F	3511	TTP	C5M-C5-C4	-2.64	115.96	118.78
2	C	3504	TTP	O3B-PB-O1B	-2.64	102.78	110.70
2	F	3510	TTP	C2'-C3'-C4'	2.63	108.14	102.80
2	F	3510	TTP	O4'-C1'-C2'	-2.62	101.34	106.25
2	F	3511	TTP	O4'-C4'-C5'	2.62	117.74	109.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	A	3501	TTP	O3G-PG-O3B	2.55	113.18	104.64
2	A	3501	TTP	O5'-C5'-C4'	2.54	117.65	108.99
2	D	3506	TTP	C3'-C2'-C1'	2.53	108.80	102.60
2	C	3505	TTP	O2B-PB-O1B	2.52	124.17	112.44
2	G	3512	TTP	O2G-PG-O3B	-2.52	96.19	104.64
2	B	3502	TTP	C5-C4-N3	2.51	117.50	115.32
2	C	3505	TTP	O2-C2-N1	-2.47	119.58	122.80
2	H	3515	TTP	O3G-PG-O3B	2.47	112.91	104.64
2	F	3510	TTP	O3G-PG-O3B	2.47	112.90	104.64
2	H	3514	TTP	O2B-PB-O3A	2.46	113.92	107.27
2	G	3512	TTP	C1'-N1-C2	2.45	122.44	117.66
2	A	3501	TTP	O3'-C3'-C2'	2.44	119.36	110.88
2	B	3502	TTP	N3-C2-N1	2.42	118.04	114.89
2	A	3501	TTP	C1'-N1-C2	2.41	122.37	117.66
2	H	3514	TTP	C6-N1-C2	2.40	123.69	121.30
2	D	3507	TTP	C5-C4-N3	2.40	117.41	115.32
2	C	3504	TTP	O3G-PG-O3B	2.38	112.62	104.64
2	G	3512	TTP	C6-C5-C4	2.38	119.98	118.02
2	H	3514	TTP	C5M-C5-C4	-2.36	116.26	118.78
2	A	3500	TTP	C5M-C5-C6	-2.36	119.66	122.85
2	F	3510	TTP	O4'-C1'-N1	2.33	112.00	107.86
2	E	3509	TTP	C5M-C5-C6	-2.32	119.71	122.85
2	F	3510	TTP	O2B-PB-O1B	2.32	123.23	112.44
2	F	3511	TTP	O2B-PB-O1B	2.31	123.21	112.44
2	C	3504	TTP	O2B-PB-O1B	2.31	123.21	112.44
2	A	3501	TTP	O3A-PA-O1A	-2.31	103.75	110.70
2	D	3506	TTP	C2'-C3'-C4'	2.29	107.45	102.80
2	E	3509	TTP	O3'-C3'-C2'	2.29	118.85	110.88
2	G	3512	TTP	C5-C4-N3	2.29	117.32	115.32
2	H	3514	TTP	O3G-PG-O3B	2.28	112.27	104.64
2	B	3503	TTP	O5'-C5'-C4'	2.26	116.70	108.99
2	F	3511	TTP	C5M-C5-C6	-2.26	119.79	122.85
2	H	3515	TTP	O4-C4-C5	-2.26	122.33	124.92
2	E	3508	TTP	O2B-PB-O3B	2.25	113.34	107.27
2	E	3508	TTP	O3G-PG-O2G	2.24	116.20	107.80
2	E	3509	TTP	C1'-N1-C2	2.23	122.03	117.66
2	E	3509	TTP	C2'-C3'-C4'	2.23	107.33	102.80
2	F	3511	TTP	C2'-C3'-C4'	2.23	107.32	102.80
2	A	3500	TTP	PA-O5'-C5'	-2.23	108.59	121.35
2	E	3509	TTP	O2A-PA-O3A	2.23	113.29	107.27
2	F	3510	TTP	O3B-PG-O1G	-2.23	99.33	111.04
2	F	3511	TTP	O3G-PG-O3B	2.22	112.07	104.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	D	3506	TTP	O3G-PG-O2G	2.21	116.10	107.80
2	H	3514	TTP	O2A-PA-O1A	2.21	122.72	112.44
2	B	3502	TTP	O3G-PG-O2G	2.20	116.06	107.80
2	G	3513	TTP	O3G-PG-O2G	2.20	116.06	107.80
2	D	3506	TTP	O4'-C4'-C5'	2.19	116.36	109.33
2	F	3510	TTP	O3'-C3'-C4'	-2.19	101.77	110.07
2	A	3501	TTP	O2B-PB-O1B	2.19	122.62	112.44
2	C	3504	TTP	O2G-PG-O3B	-2.17	97.36	104.64
2	B	3502	TTP	O2-C2-N1	-2.17	119.98	122.80
2	B	3503	TTP	C2'-C3'-C4'	2.16	107.19	102.80
2	C	3504	TTP	O2-C2-N1	-2.16	119.99	122.80
2	B	3503	TTP	O4'-C4'-C5'	2.15	116.23	109.33
2	E	3509	TTP	O3G-PG-O3B	2.14	111.80	104.64
2	G	3513	TTP	N3-C2-N1	2.13	117.66	114.89
2	G	3512	TTP	O4-C4-C5	-2.13	122.48	124.92
2	E	3509	TTP	O2A-PA-O1A	2.12	122.31	112.44
2	H	3515	TTP	C2'-C1'-N1	-2.11	108.53	113.81
2	E	3508	TTP	O2A-PA-O1A	2.11	122.24	112.44
2	B	3502	TTP	C2'-C3'-C4'	2.10	107.07	102.80
2	C	3505	TTP	O3G-PG-O2G	2.10	115.67	107.80
2	H	3514	TTP	O2B-PB-O3B	-2.09	101.61	107.27
2	A	3500	TTP	C2'-C3'-C4'	2.09	107.04	102.80
2	A	3501	TTP	O3'-C3'-C4'	-2.08	102.19	110.07
2	G	3512	TTP	O3B-PB-O1B	-2.07	104.49	110.70
2	D	3507	TTP	C5M-C5-C4	-2.06	116.58	118.78
2	D	3507	TTP	O3G-PG-O3B	2.05	111.51	104.64
2	G	3513	TTP	O2A-PA-O1A	2.03	121.90	112.44
2	E	3508	TTP	C5M-C5-C4	-2.03	116.62	118.78
2	C	3504	TTP	C3'-C2'-C1'	2.03	107.56	102.60
2	B	3503	TTP	O2-C2-N1	-2.01	120.18	122.80
2	D	3507	TTP	O3'-C3'-C4'	-2.00	102.47	110.07

There are no chirality outliers.

All (65) torsion outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms
2	A	3500	TTP	C5'-O5'-PA-O3A
2	B	3502	TTP	PB-O3A-PA-O5'
2	B	3502	TTP	C5'-O5'-PA-O1A
2	C	3504	TTP	C5'-O5'-PA-O1A
2	C	3504	TTP	C5'-O5'-PA-O3A
2	D	3506	TTP	C5'-O5'-PA-O1A

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms
2	D	3507	TTP	C5'-O5'-PA-O1A
2	D	3507	TTP	PB-O3B-PG-O3G
2	E	3508	TTP	C5'-O5'-PA-O1A
2	E	3508	TTP	C5'-O5'-PA-O3A
2	F	3510	TTP	PB-O3A-PA-O5'
2	F	3510	TTP	C5'-O5'-PA-O1A
2	F	3511	TTP	PB-O3B-PG-O3G
2	G	3512	TTP	C5'-O5'-PA-O3A
2	H	3514	TTP	C5'-O5'-PA-O1A
2	H	3515	TTP	PB-O3B-PG-O3G
2	C	3505	TTP	PB-O3B-PG-O1G
2	F	3511	TTP	PB-O3B-PG-O1G
2	H	3514	TTP	PB-O3B-PG-O1G
2	F	3510	TTP	C3'-C4'-C5'-O5'
2	A	3500	TTP	PG-O3B-PB-O1B
2	E	3508	TTP	PG-O3B-PB-O1B
2	G	3512	TTP	PG-O3B-PB-O1B
2	C	3504	TTP	O4'-C4'-C5'-O5'
2	C	3504	TTP	C3'-C4'-C5'-O5'
2	A	3500	TTP	PB-O3A-PA-O5'
2	C	3504	TTP	PB-O3A-PA-O5'
2	D	3506	TTP	PB-O3A-PA-O5'
2	E	3508	TTP	PB-O3A-PA-O5'
2	G	3512	TTP	PB-O3A-PA-O5'
2	G	3513	TTP	PB-O3A-PA-O5'
2	H	3514	TTP	PB-O3A-PA-O5'
2	F	3510	TTP	PB-O3B-PG-O1G
2	C	3505	TTP	PB-O3B-PG-O3G
2	B	3503	TTP	PA-O3A-PB-O1B
2	D	3507	TTP	PB-O3A-PA-O2A
2	H	3515	TTP	PB-O3A-PA-O2A
2	A	3500	TTP	C5'-O5'-PA-O1A
2	D	3507	TTP	C5'-O5'-PA-O2A
2	D	3507	TTP	C5'-O5'-PA-O3A
2	G	3512	TTP	C5'-O5'-PA-O1A
2	H	3515	TTP	C5'-O5'-PA-O1A
2	H	3515	TTP	C5'-O5'-PA-O2A
2	H	3515	TTP	C5'-O5'-PA-O3A
2	C	3504	TTP	PG-O3B-PB-O1B
2	F	3510	TTP	O4'-C4'-C5'-O5'
2	C	3505	TTP	PA-O3A-PB-O1B
2	F	3511	TTP	PA-O3A-PB-O1B

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms
2	H	3515	TTP	C3'-C4'-C5'-O5'
2	A	3501	TTP	PB-O3B-PG-O2G
2	D	3507	TTP	PB-O3B-PG-O2G
2	H	3515	TTP	PB-O3B-PG-O2G
2	E	3508	TTP	C3'-C4'-C5'-O5'
2	G	3512	TTP	C3'-C4'-C5'-O5'
2	B	3502	TTP	PB-O3A-PA-O1A
2	C	3505	TTP	PA-O3A-PB-O2B
2	F	3511	TTP	PA-O3A-PB-O2B
2	H	3515	TTP	PB-O3A-PA-O1A
2	A	3500	TTP	PB-O3A-PA-O2A
2	B	3503	TTP	PA-O3A-PB-O2B
2	D	3506	TTP	PA-O3A-PB-O2B
2	D	3507	TTP	PB-O3A-PA-O1A
2	F	3510	TTP	PB-O3A-PA-O2A
2	G	3513	TTP	PA-O3A-PB-O2B
2	H	3514	TTP	PA-O3A-PB-O2B

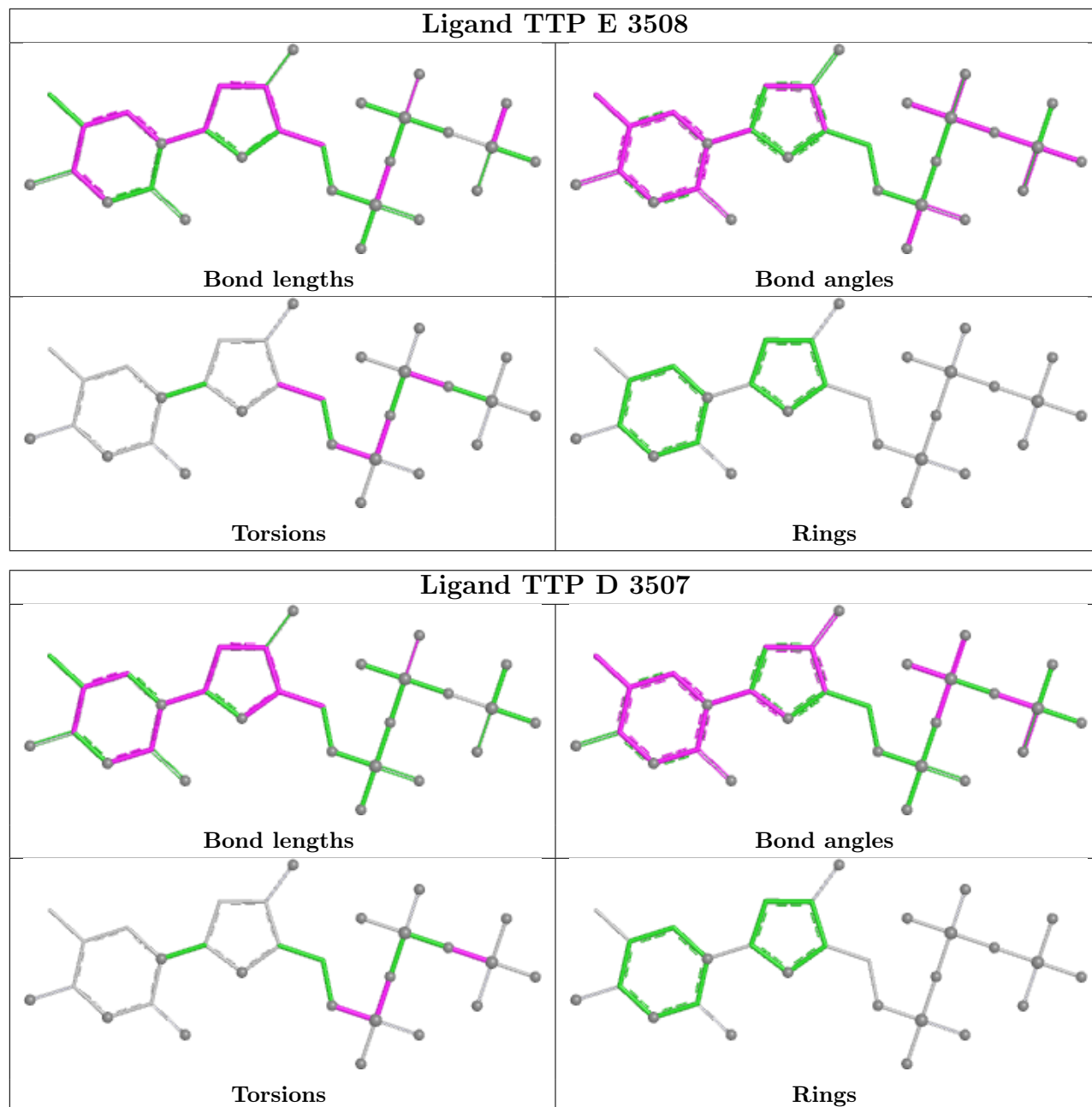
There are no ring outliers.

8 monomers are involved in 24 short contacts:

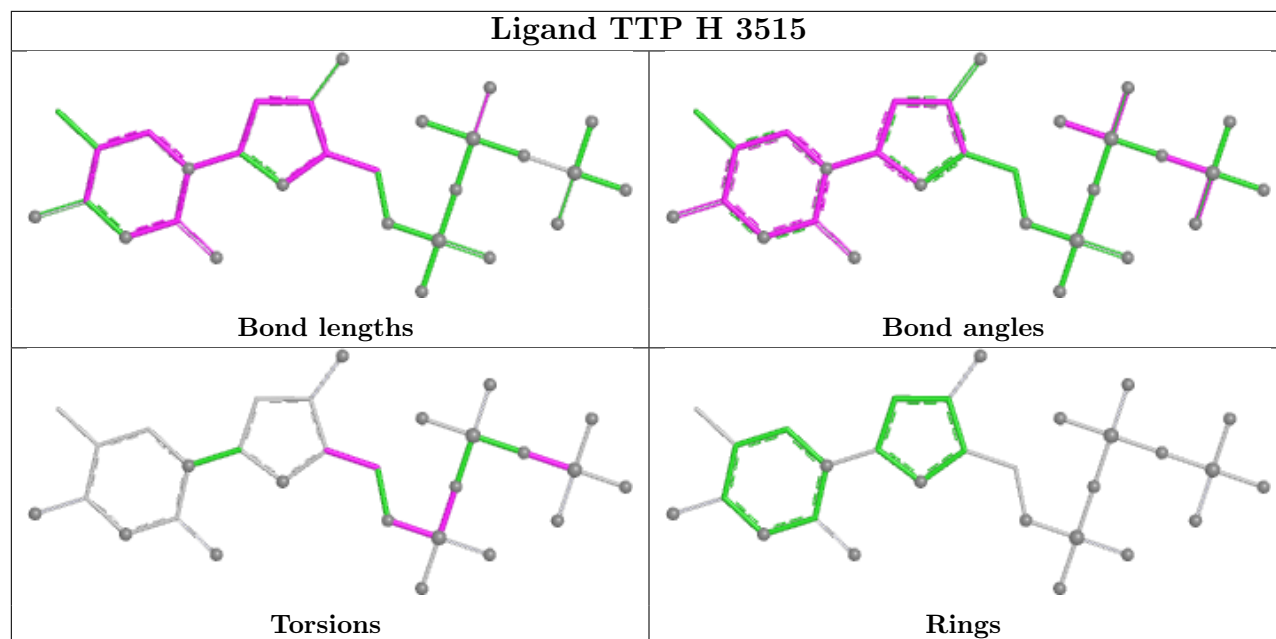
Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
2	E	3508	TTP	2	0
2	H	3514	TTP	3	0
2	G	3512	TTP	3	0
2	F	3510	TTP	3	0
2	C	3504	TTP	3	0
2	D	3506	TTP	3	0
2	B	3502	TTP	4	0
2	A	3500	TTP	3	0

The following is a two-dimensional graphical depiction of Mogul quality analysis of bond lengths, bond angles, torsion angles, and ring geometry for all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the validation Tables will also be included. For torsion angles, if less than 5% of the Mogul distribution of torsion angles is within 10 degrees of the torsion angle in question, then that torsion angle is considered an outlier. Any bond that is central to one or more torsion angles identified as an outlier by Mogul will be highlighted in the graph. For rings, the root-mean-square deviation (RMSD) between the ring in question and similar rings identified by Mogul is calculated over all ring torsion angles. If the average RMSD is greater than 60 degrees and the minimal RMSD between the ring in question and any Mogul-identified rings is also greater than 60 degrees, then that ring is considered an outlier. The outliers are highlighted in purple. The color gray indicates Mogul did not find sufficient

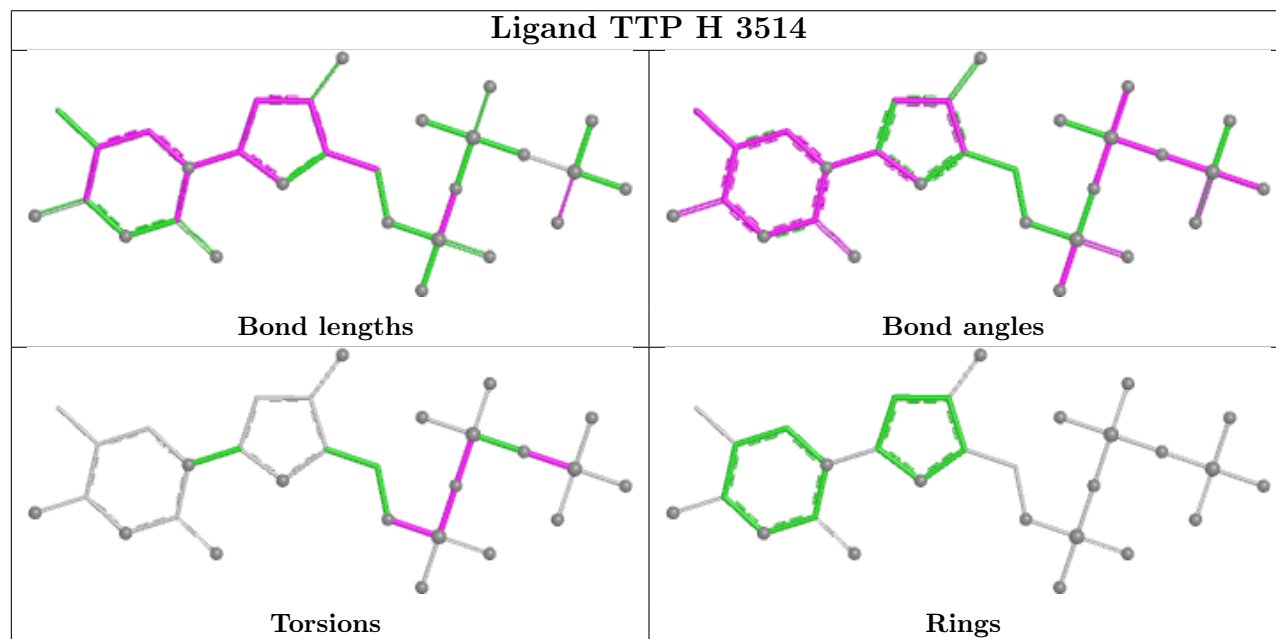
equivalents in the CSD to analyse the geometry.



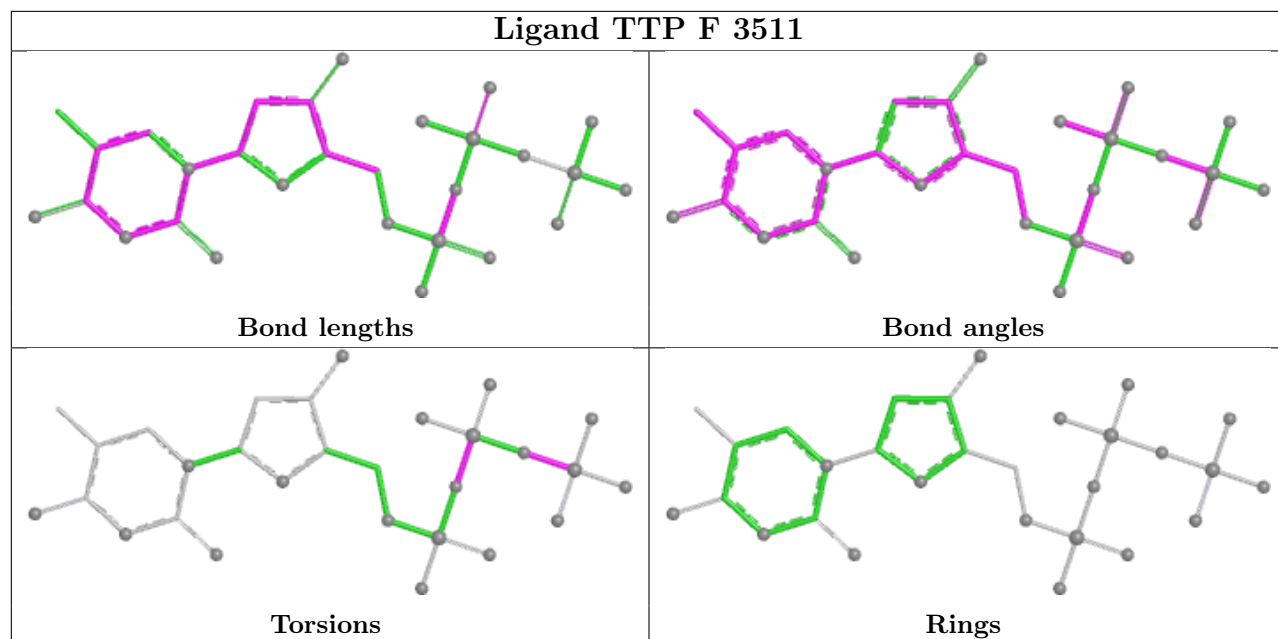
Ligand TTP H 3515



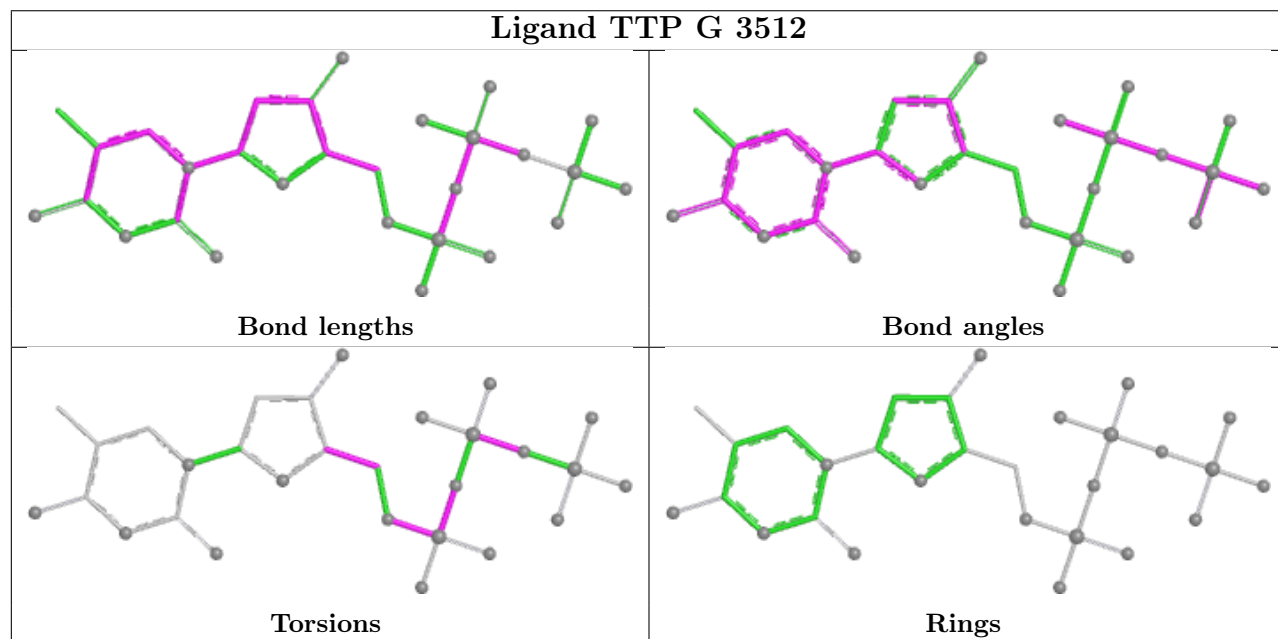
Ligand TTP H 3514



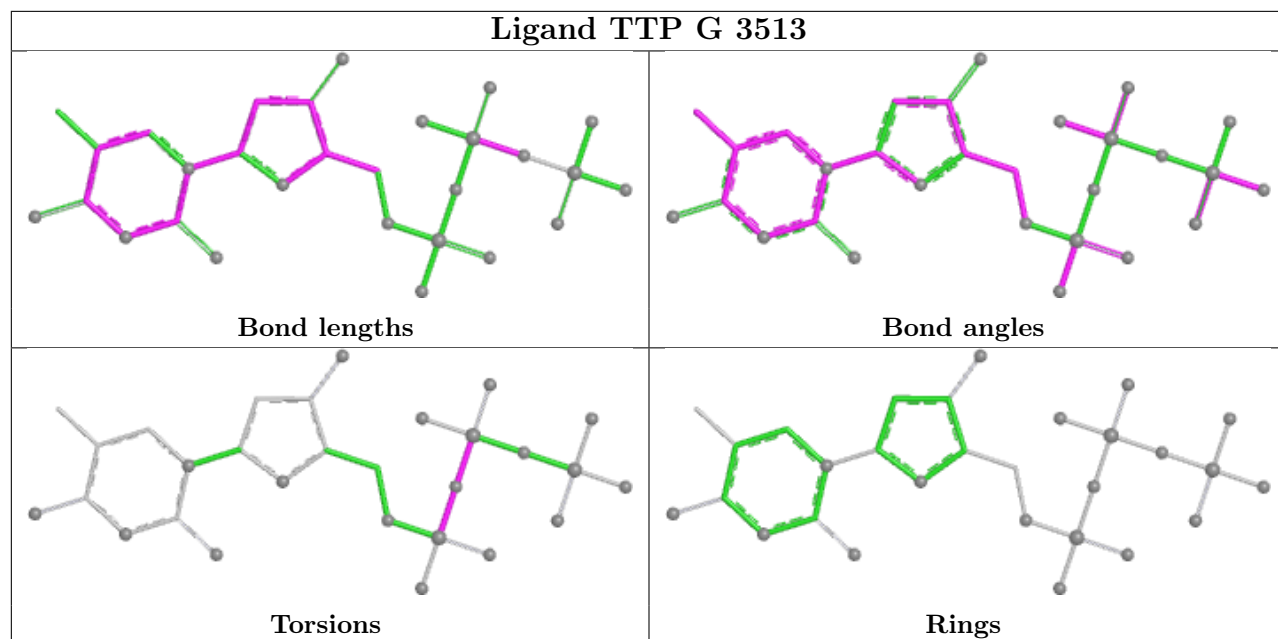
Ligand TTP F 3511



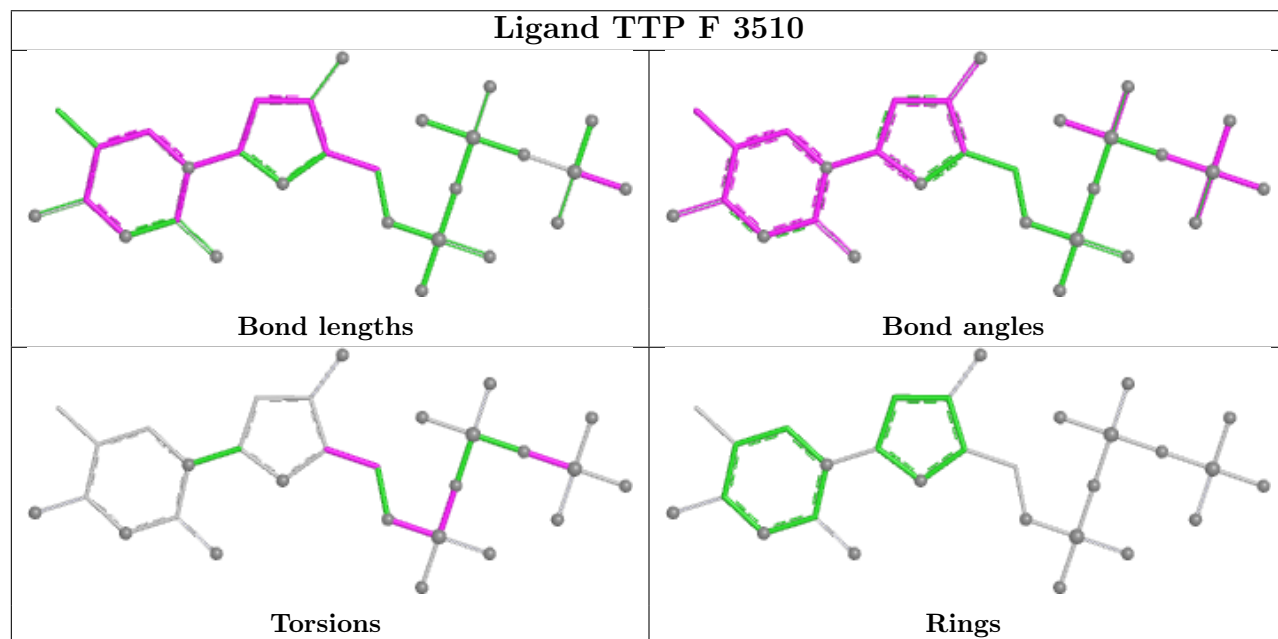
Ligand TTP G 3512



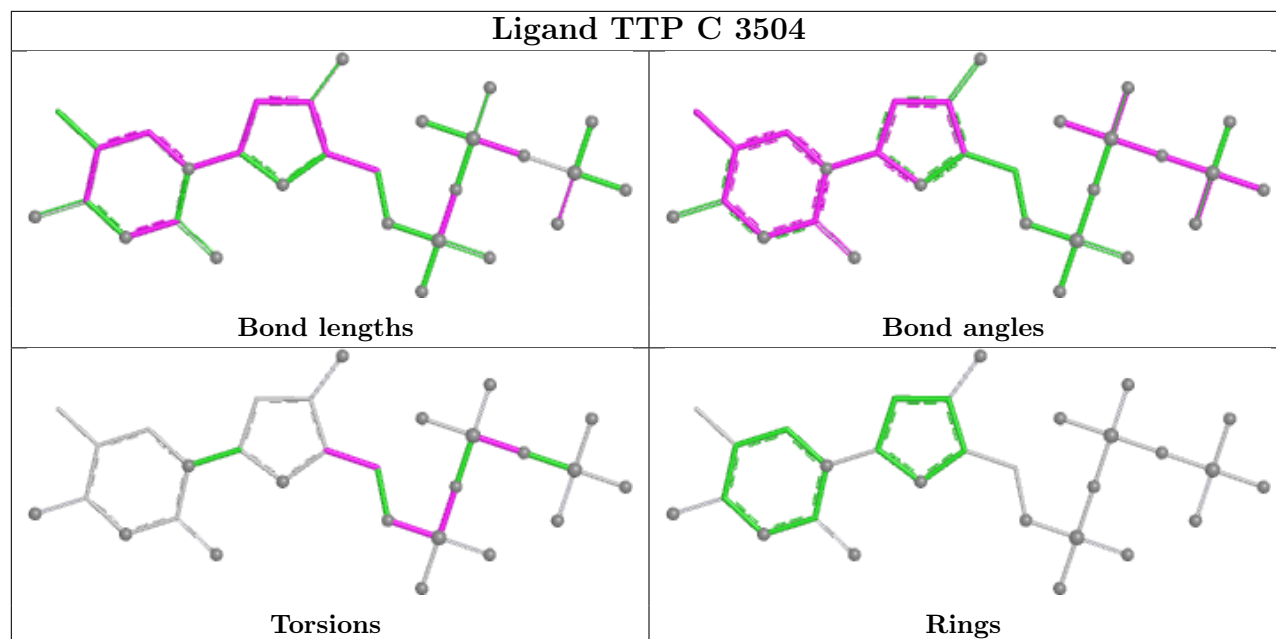
Ligand TTP G 3513



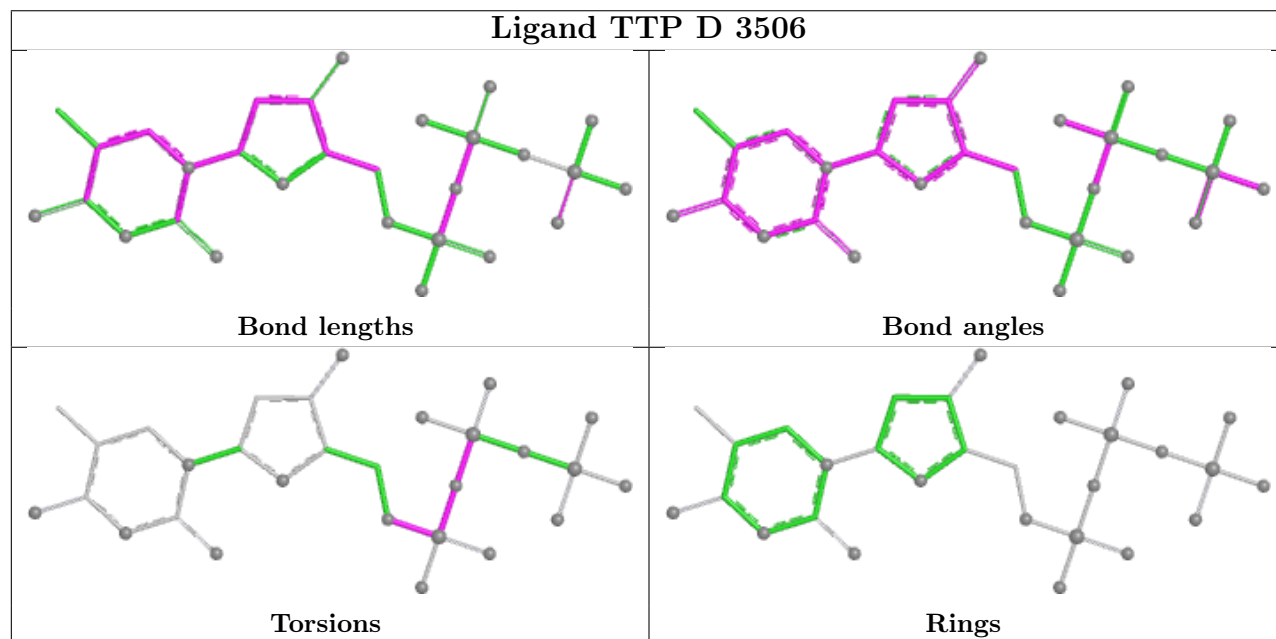
Ligand TTP F 3510



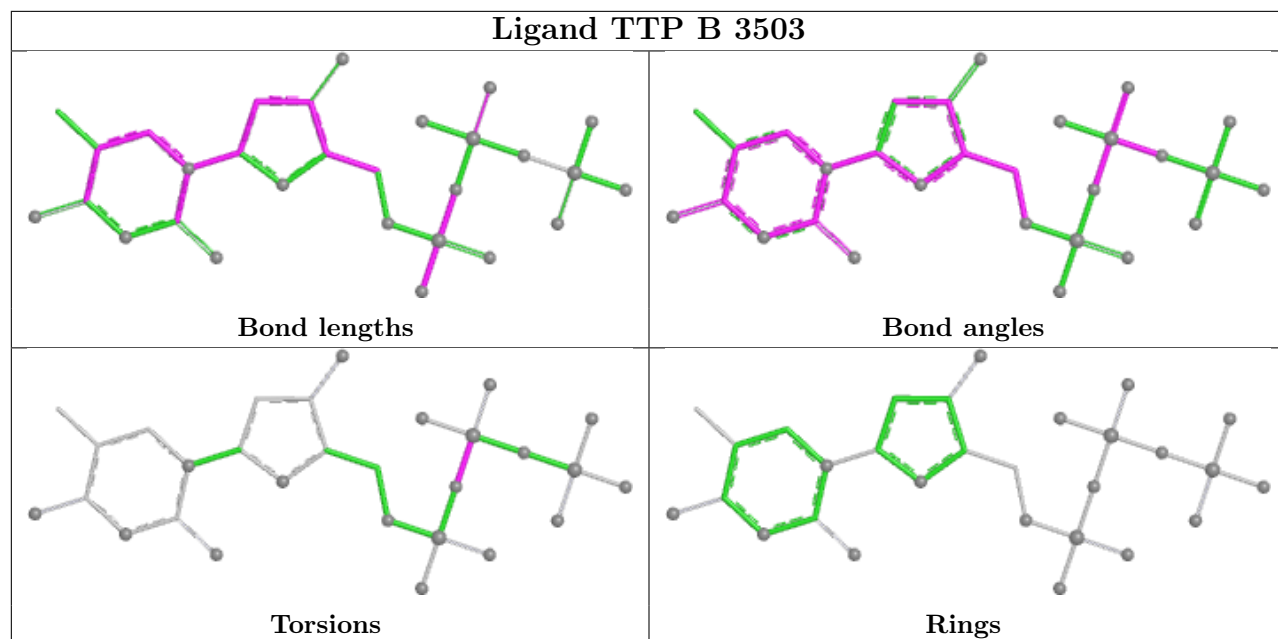
Ligand TTP C 3504



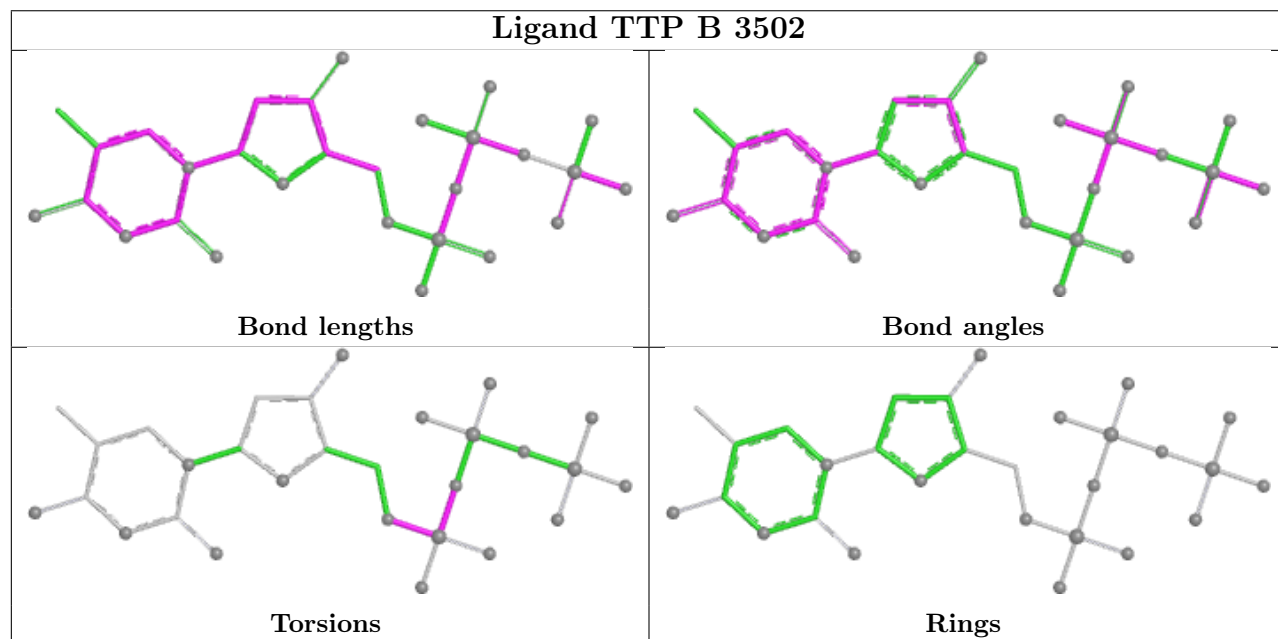
Ligand TTP D 3506



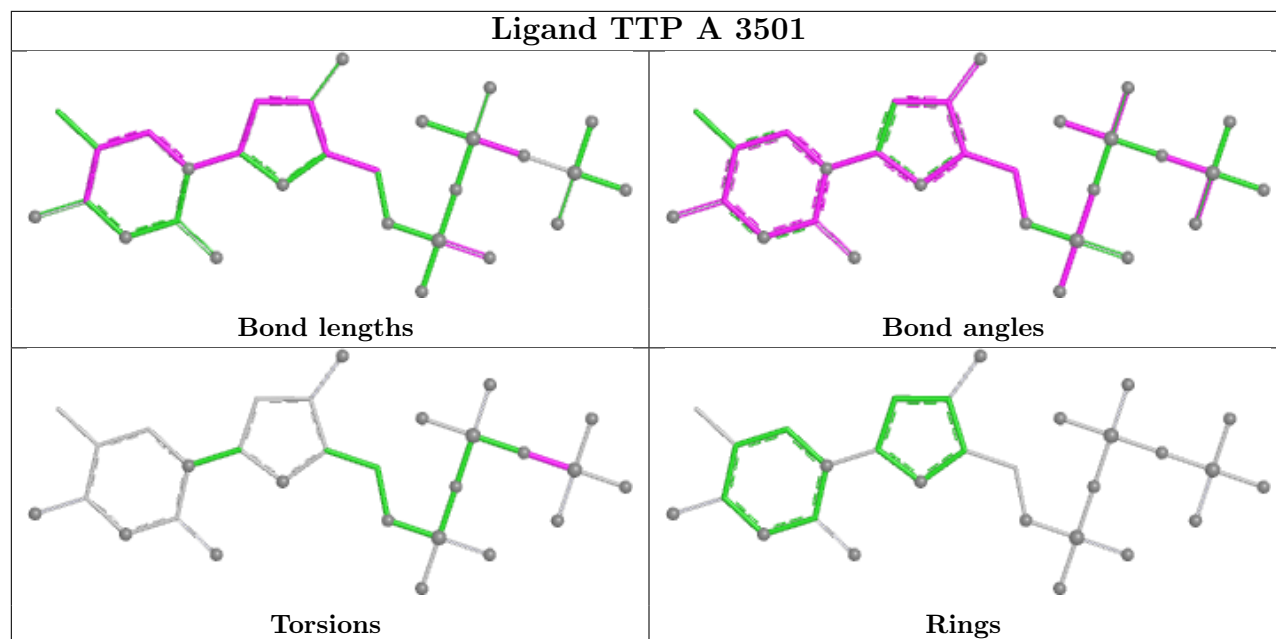
Ligand TTP B 3503



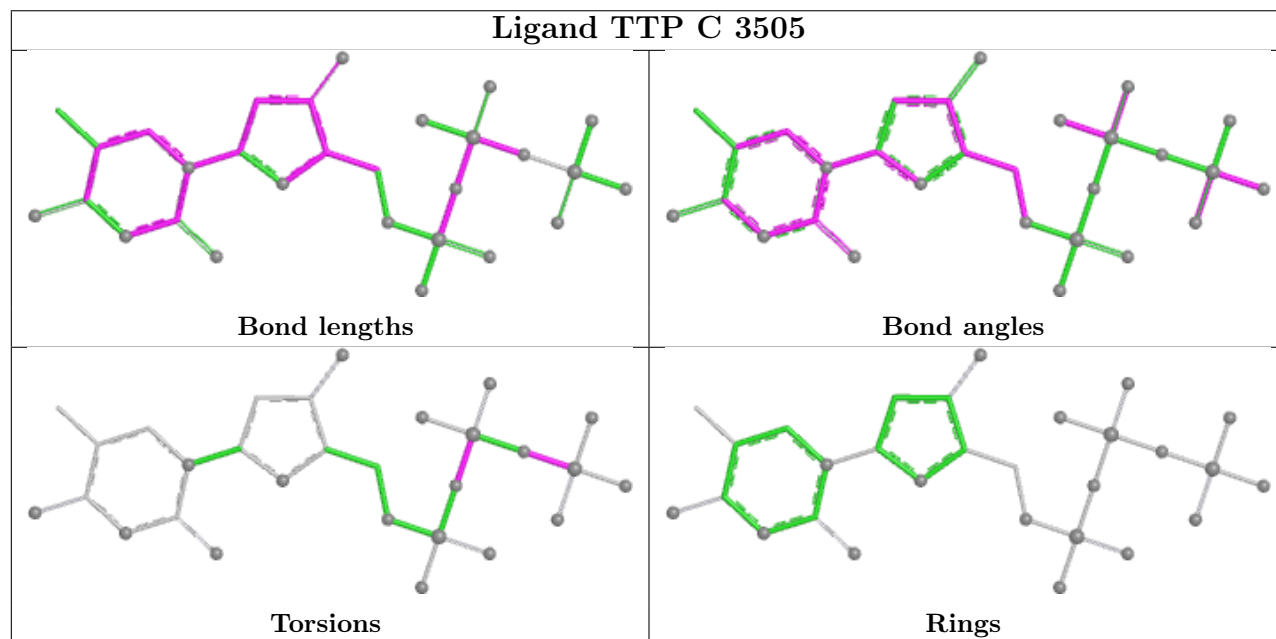
Ligand TTP B 3502

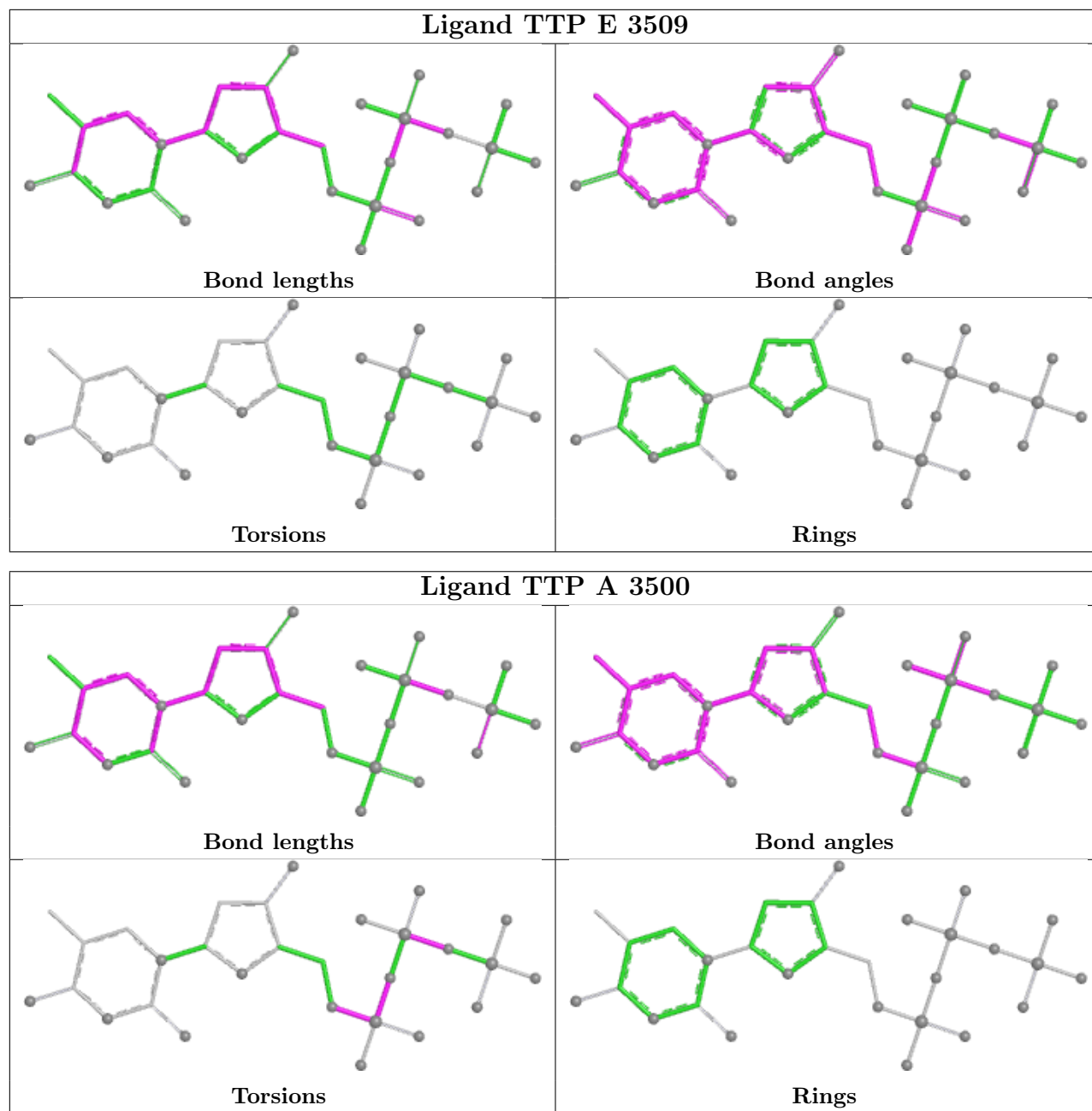


Ligand TTP A 3501



Ligand TTP C 3505





5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data

6.1 Protein, DNA and RNA chains

In the following table, the column labelled ‘#RSRZ > 2’ contains the number (and percentage) of RSRZ outliers, followed by percent RSRZ outliers for the chain as percentile scores relative to all X-ray entries and entries of similar resolution. The OWAB column contains the minimum, median, 95th percentile and maximum values of the occupancy-weighted average B-factor per residue. The column labelled ‘Q < 0.9’ lists the number of (and percentage) of residues with an average occupancy less than 0.9.

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	A	292/293 (99%)	-0.29	4 (1%) 73 69	6, 12, 23, 33	0
1	B	292/293 (99%)	-0.18	4 (1%) 73 69	6, 12, 23, 33	0
1	C	292/293 (99%)	-0.18	5 (1%) 69 64	5, 12, 23, 39	0
1	D	292/293 (99%)	-0.17	5 (1%) 69 64	5, 12, 24, 33	0
1	E	292/293 (99%)	-0.32	0 100 100	5, 12, 23, 35	0
1	F	292/293 (99%)	-0.26	2 (0%) 84 82	5, 12, 24, 34	0
1	G	292/293 (99%)	-0.26	3 (1%) 79 76	6, 12, 23, 33	0
1	H	292/293 (99%)	-0.27	2 (0%) 84 82	6, 12, 25, 32	0
All	All	2336/2344 (99%)	-0.24	25 (1%) 78 74	5, 12, 24, 39	0

All (25) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	C	22	ALA	5.6
1	C	23	ILE	4.8
1	D	23	ILE	4.7
1	G	119	HIS	4.0
1	H	22	ALA	3.4
1	A	22	ALA	3.2
1	C	194	ARG	3.1
1	C	119	HIS	2.9
1	B	278	ASN	2.5
1	B	23	ILE	2.5
1	D	60	THR	2.4
1	D	101	ASN	2.4
1	H	119	HIS	2.4
1	D	65	GLN	2.4
1	F	97	SER	2.3
1	A	194	ARG	2.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	F	278	ASN	2.3
1	B	194	ARG	2.2
1	C	193	PRO	2.2
1	A	65	GLN	2.2
1	G	127	GLN	2.2
1	A	278	ASN	2.1
1	G	128	ARG	2.0
1	B	22	ALA	2.0
1	D	128	ARG	2.0

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

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

6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.4 Ligands [i](#)

In the following table, the Atoms column lists the number of modelled atoms in the group and the number defined in the chemical component dictionary. The B-factors column lists the minimum, median, 95th percentile and maximum values of B factors of atoms in the group. The column labelled 'Q< 0.9' lists the number of atoms with occupancy less than 0.9.

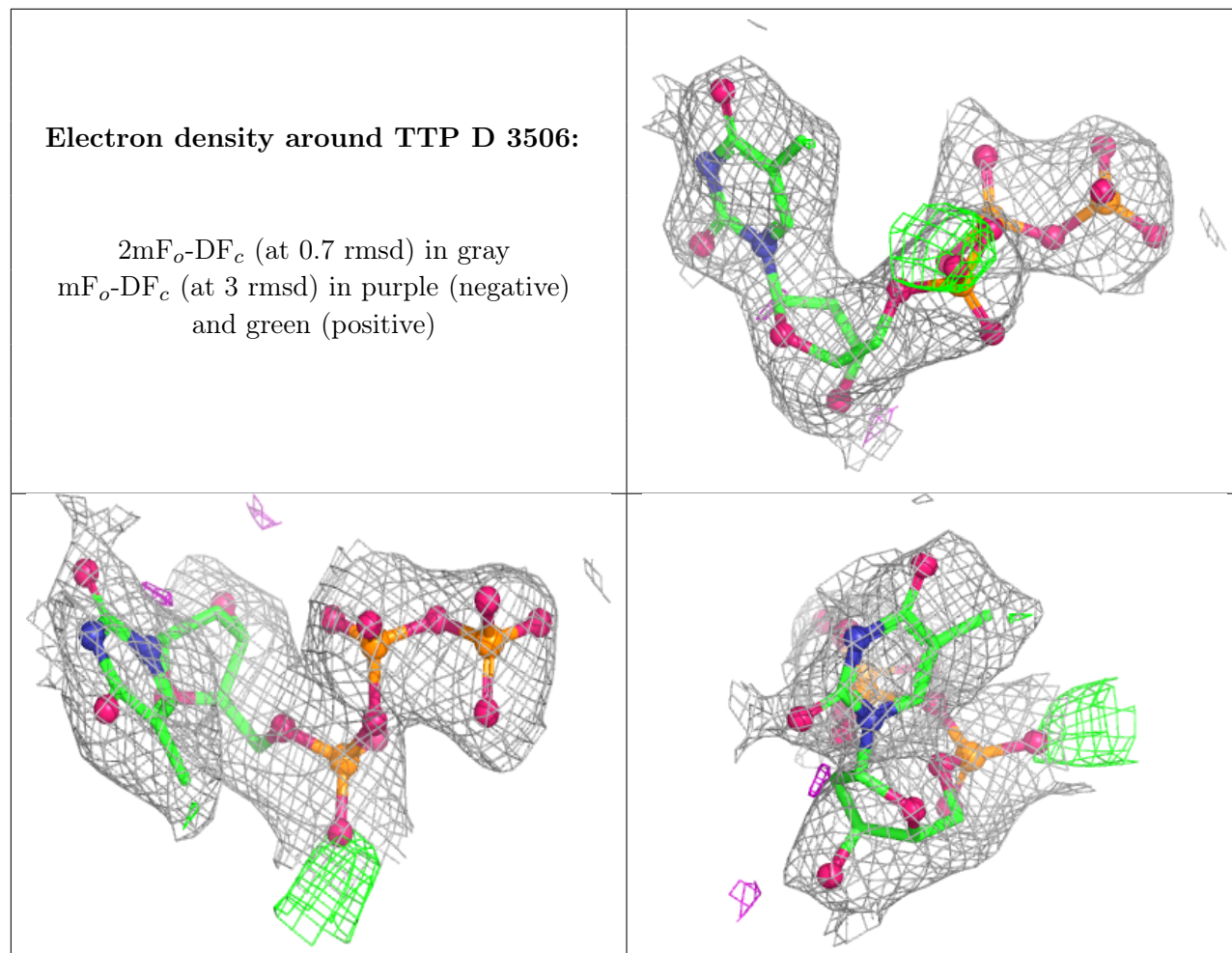
Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors($\text{\AA}^2$)	Q<0.9
2	TTP	D	3506	29/29	0.86	0.13	25,33,45,49	0
2	TTP	B	3502	29/29	0.89	0.11	18,30,43,46	0
2	TTP	G	3512	29/29	0.91	0.10	13,29,40,44	0
2	TTP	F	3510	29/29	0.92	0.10	15,29,38,41	0
2	TTP	A	3500	29/29	0.92	0.11	20,30,41,42	0
2	TTP	H	3514	29/29	0.92	0.10	26,31,38,43	0
2	TTP	E	3508	29/29	0.93	0.10	19,27,36,43	0
2	TTP	C	3505	29/29	0.93	0.09	11,26,46,47	0
2	TTP	A	3501	29/29	0.93	0.10	12,20,43,46	0
2	TTP	G	3513	29/29	0.93	0.09	9,24,41,47	0
2	TTP	D	3507	29/29	0.93	0.09	11,21,43,45	0
2	TTP	H	3515	29/29	0.93	0.09	10,22,42,47	0
2	TTP	C	3504	29/29	0.94	0.09	22,30,37,41	0
2	TTP	F	3511	29/29	0.94	0.10	8,22,39,41	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

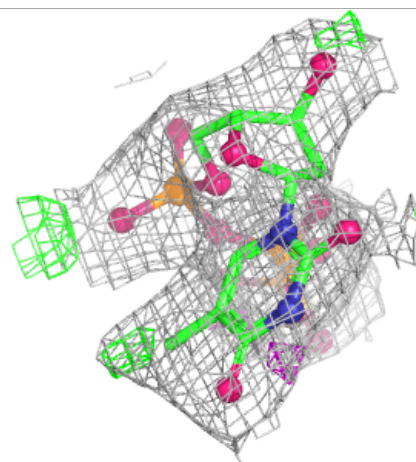
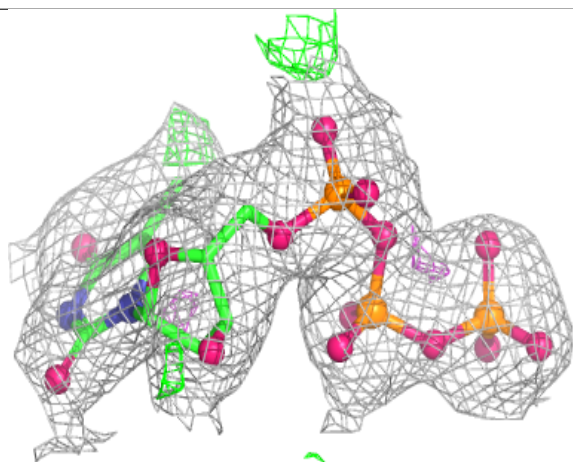
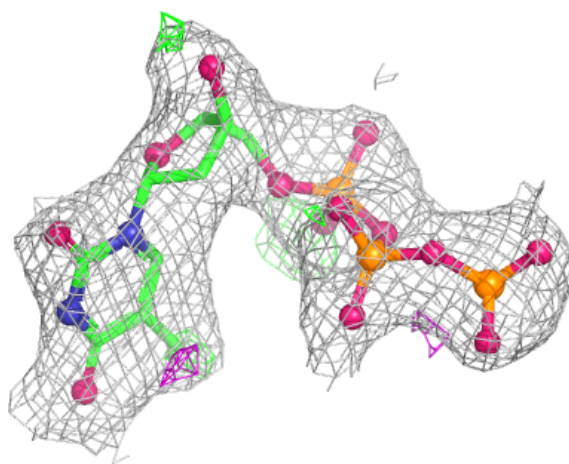
Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors($\text{\AA}^2$)	Q<0.9
2	TTP	B	3503	29/29	0.95	0.09	6,20,29,33	0
2	TTP	E	3509	29/29	0.95	0.08	10,20,40,42	0

The following is a graphical depiction of the model fit to experimental electron density of all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the geometry validation Tables will also be included. Each fit is shown from different orientation to approximate a three-dimensional view.



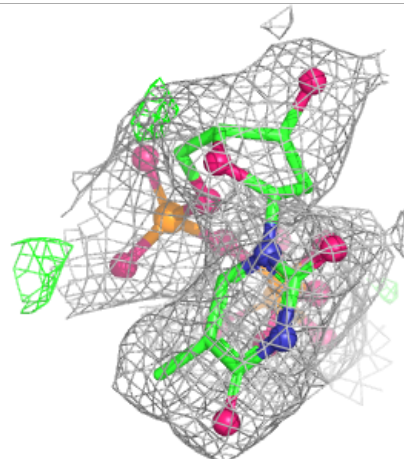
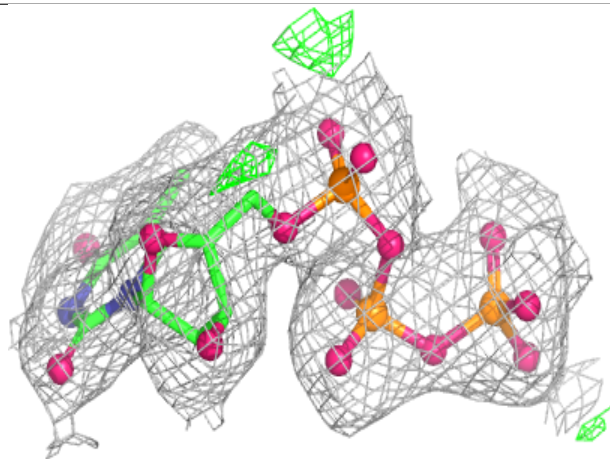
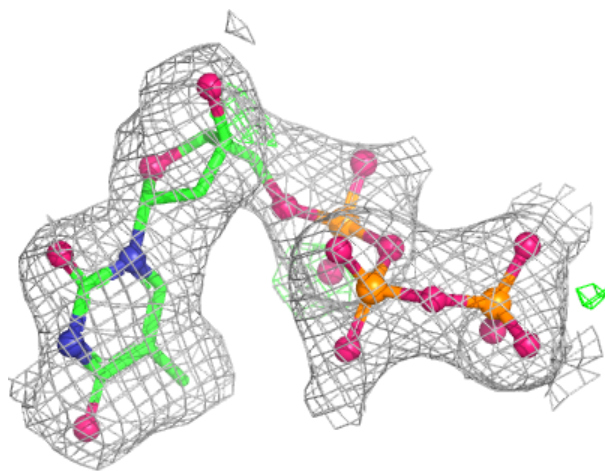
Electron density around TTP B 3502:

$2mF_o-DF_c$ (at 0.7 rmsd) in gray
 mF_o-DF_c (at 3 rmsd) in purple (negative)
and green (positive)



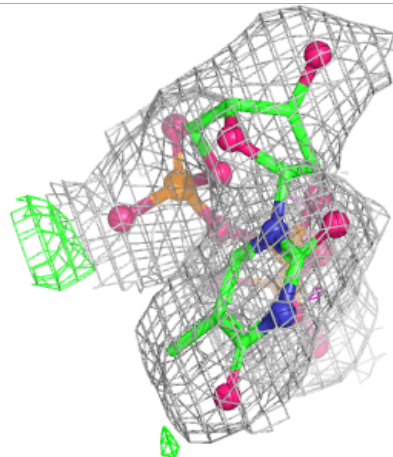
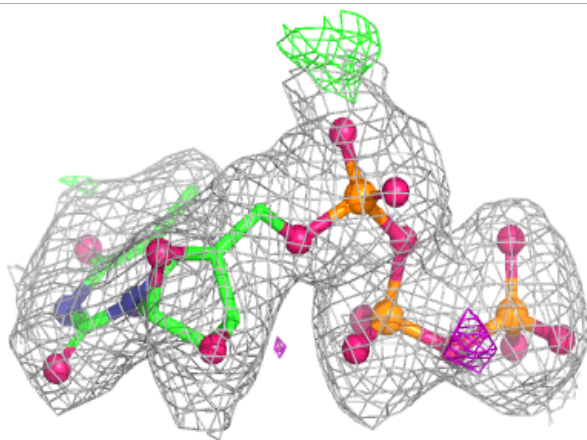
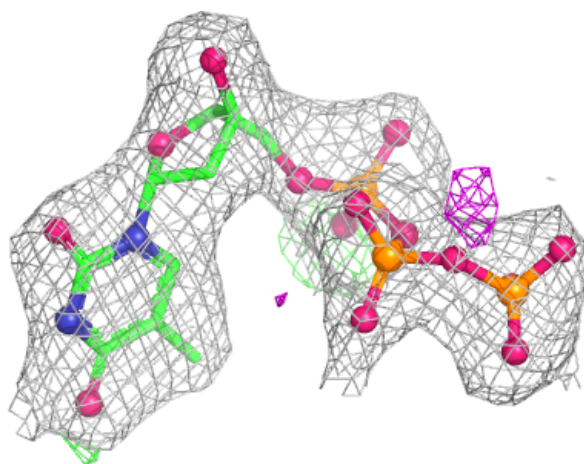
Electron density around TTP G 3512:

$2mF_o-DF_c$ (at 0.7 rmsd) in gray
 mF_o-DF_c (at 3 rmsd) in purple (negative)
and green (positive)



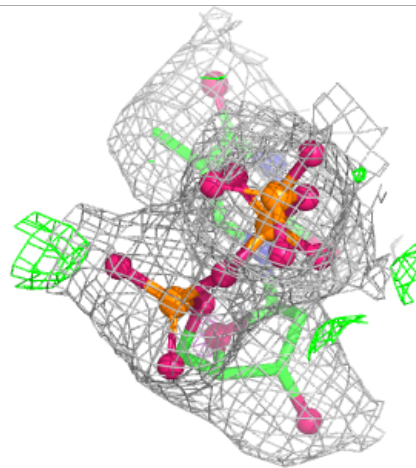
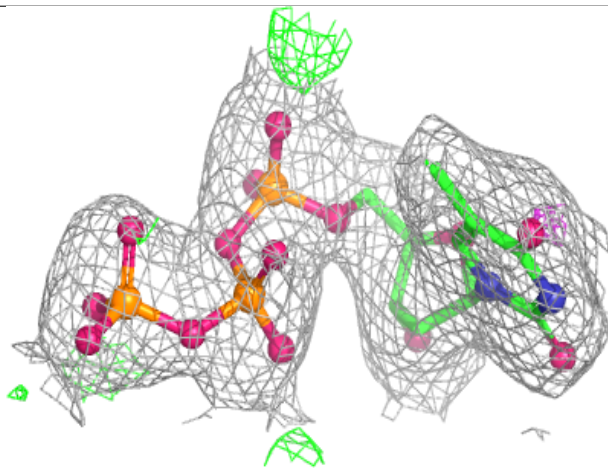
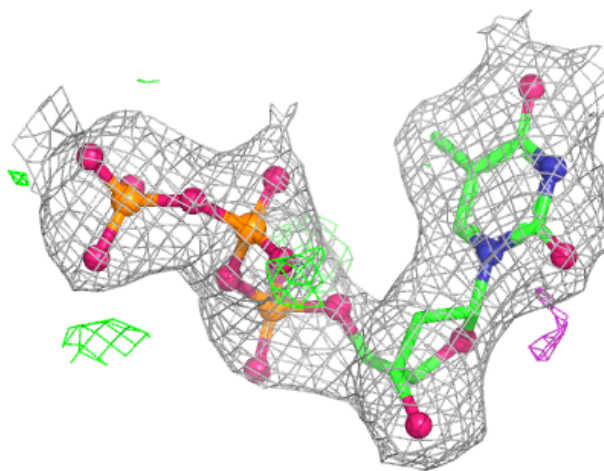
Electron density around TTP F 3510:

$2mF_o-DF_c$ (at 0.7 rmsd) in gray
 mF_o-DF_c (at 3 rmsd) in purple (negative)
and green (positive)



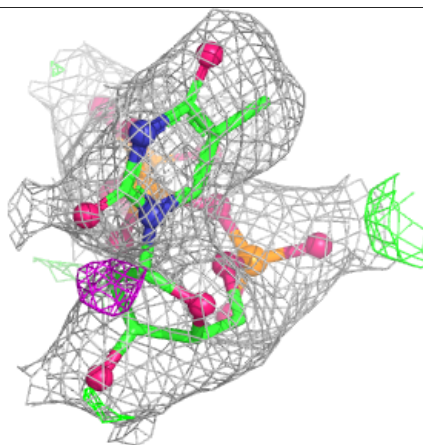
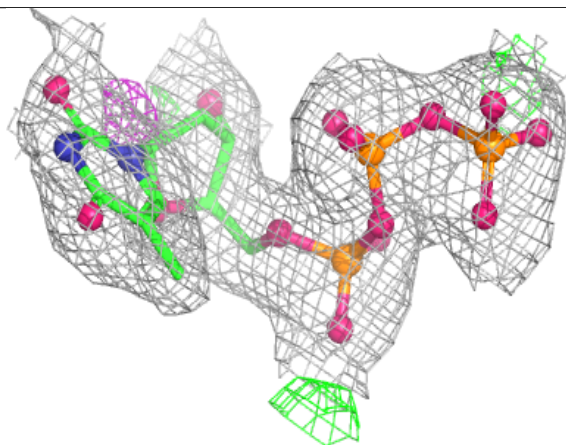
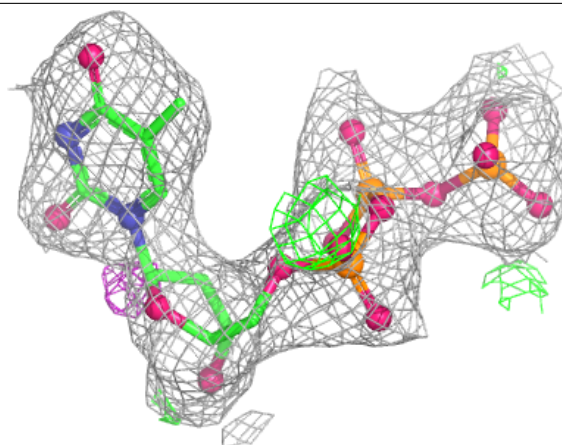
Electron density around TTP A 3500:

$2mF_o-DF_c$ (at 0.7 rmsd) in gray
 mF_o-DF_c (at 3 rmsd) in purple (negative)
and green (positive)



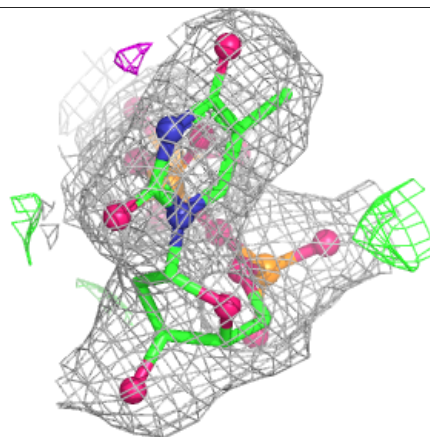
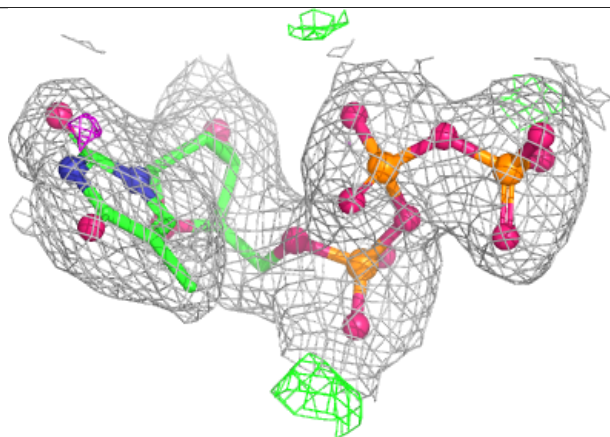
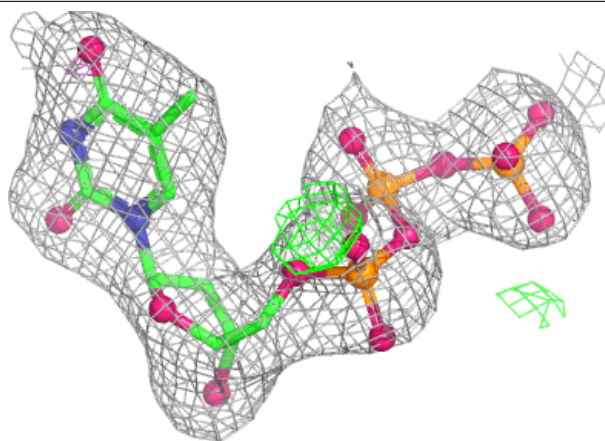
Electron density around TTP H 3514:

$2mF_o - DF_c$ (at 0.7 rmsd) in gray
 $mF_o - DF_c$ (at 3 rmsd) in purple (negative)
and green (positive)

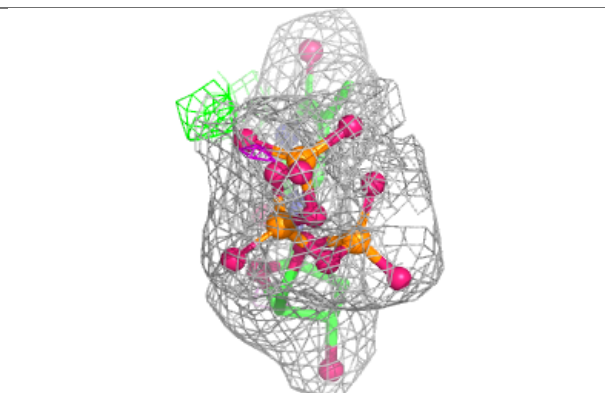
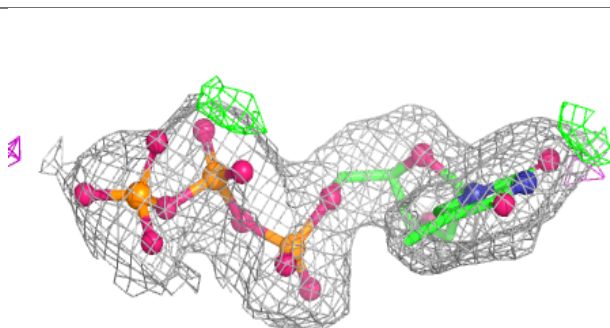
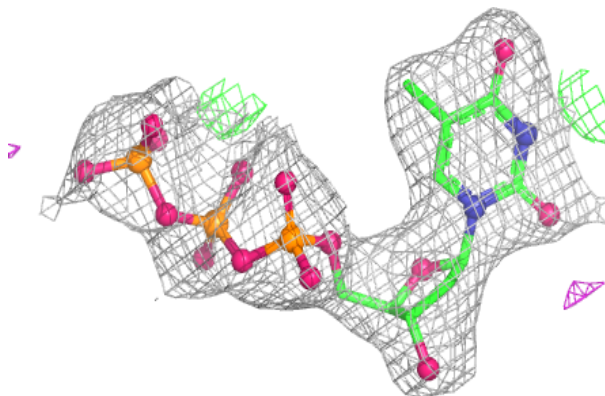


Electron density around TTP E 3508:

$2mF_o-DF_c$ (at 0.7 rmsd) in gray
 mF_o-DF_c (at 3 rmsd) in purple (negative)
and green (positive)

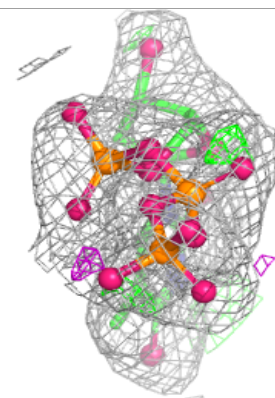
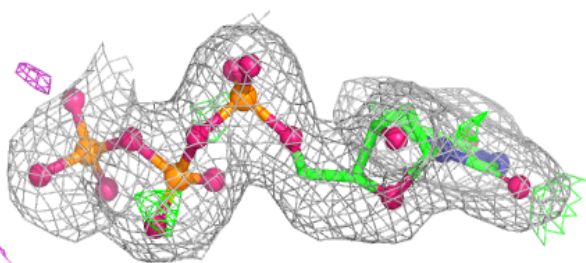
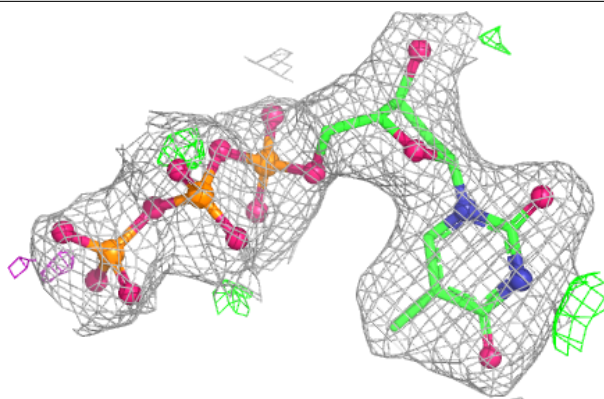
**Electron density around TTP C 3505:**

$2mF_o-DF_c$ (at 0.7 rmsd) in gray
 mF_o-DF_c (at 3 rmsd) in purple (negative)
and green (positive)

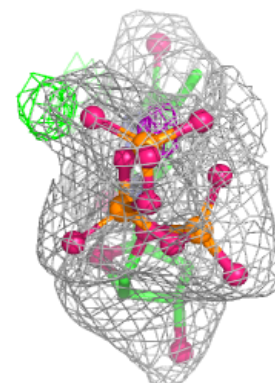
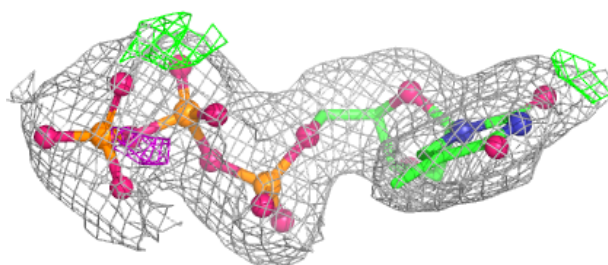
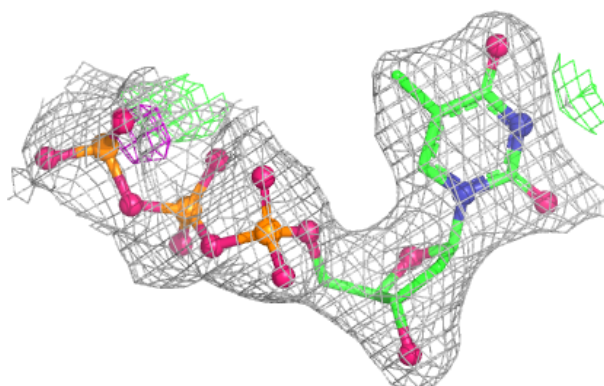


Electron density around TTP A 3501:

$2mF_o-DF_c$ (at 0.7 rmsd) in gray
 mF_o-DF_c (at 3 rmsd) in purple (negative)
and green (positive)

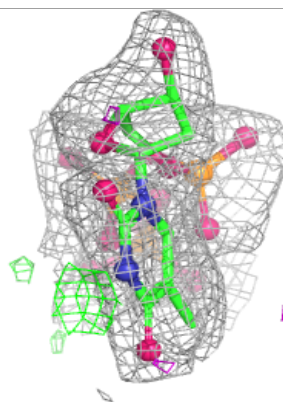
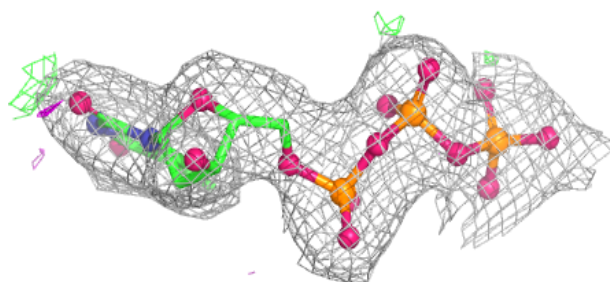
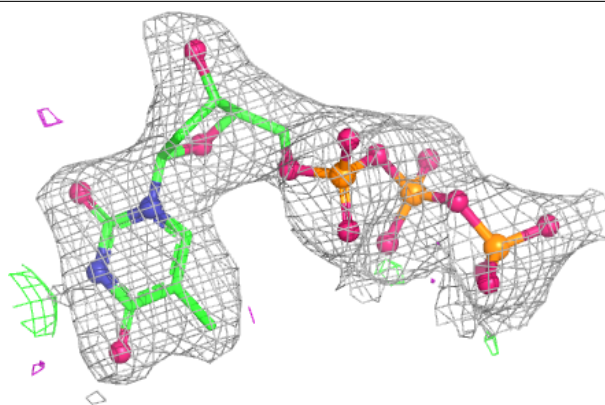
**Electron density around TTP G 3513:**

$2mF_o-DF_c$ (at 0.7 rmsd) in gray
 mF_o-DF_c (at 3 rmsd) in purple (negative)
and green (positive)

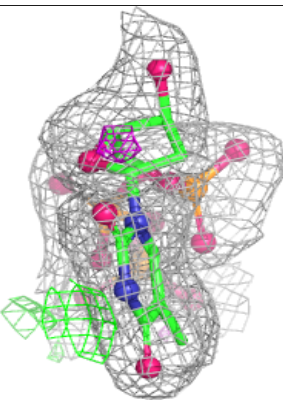
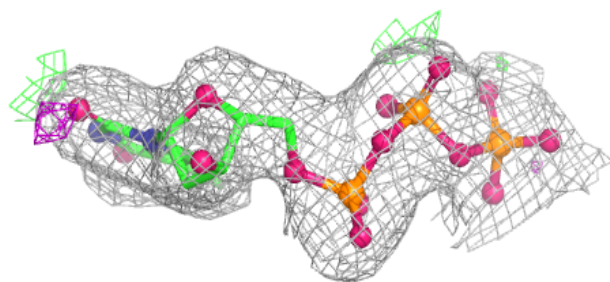
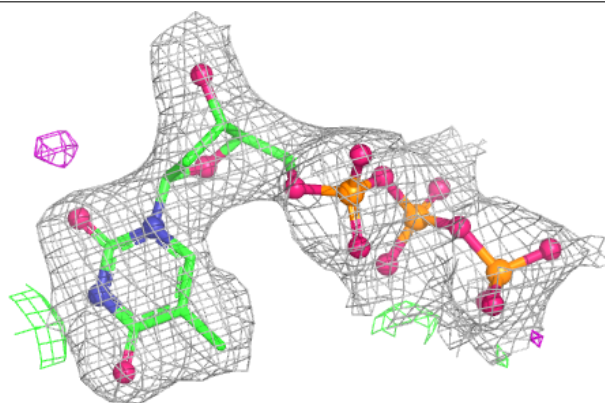


Electron density around TTP D 3507:

$2mF_o-DF_c$ (at 0.7 rmsd) in gray
 mF_o-DF_c (at 3 rmsd) in purple (negative)
and green (positive)

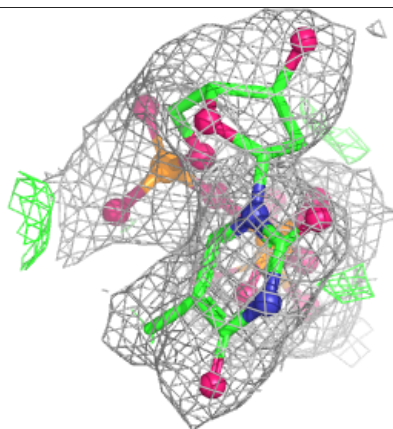
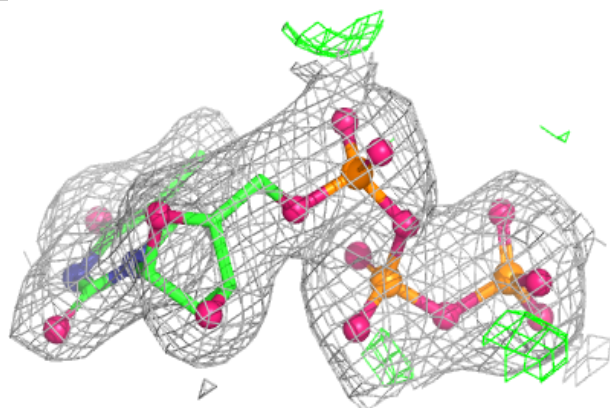
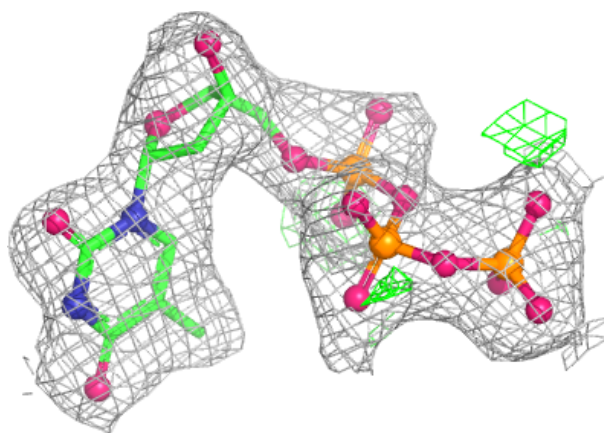
**Electron density around TTP H 3515:**

$2mF_o-DF_c$ (at 0.7 rmsd) in gray
 mF_o-DF_c (at 3 rmsd) in purple (negative)
and green (positive)



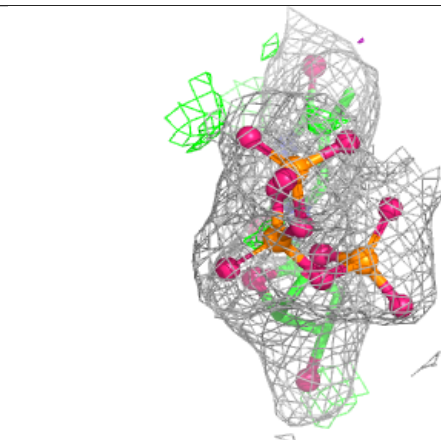
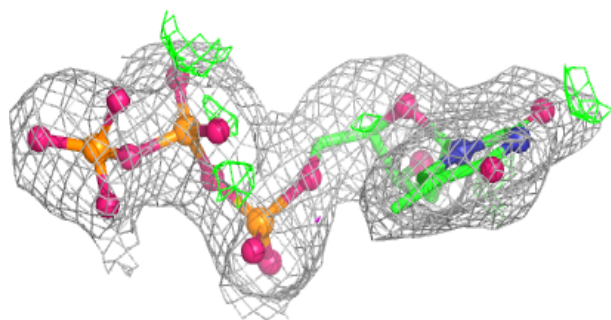
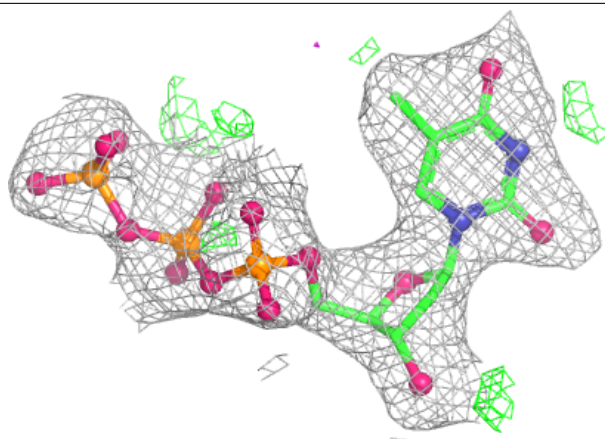
Electron density around TTP C 3504:

$2mF_o - DF_c$ (at 0.7 rmsd) in gray
 $mF_o - DF_c$ (at 3 rmsd) in purple (negative)
and green (positive)

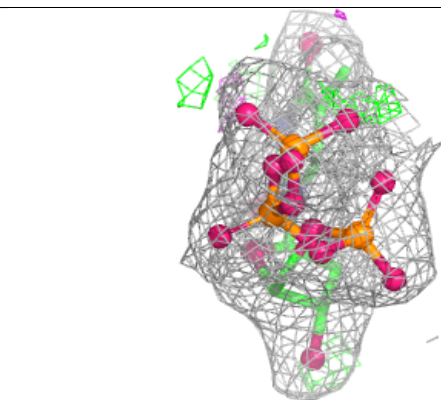
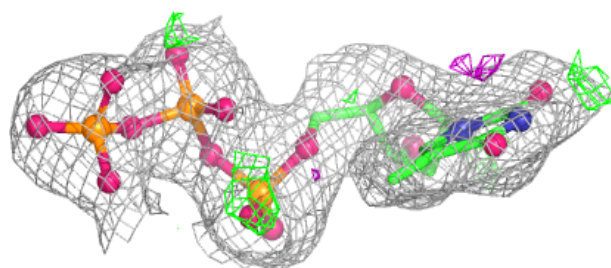
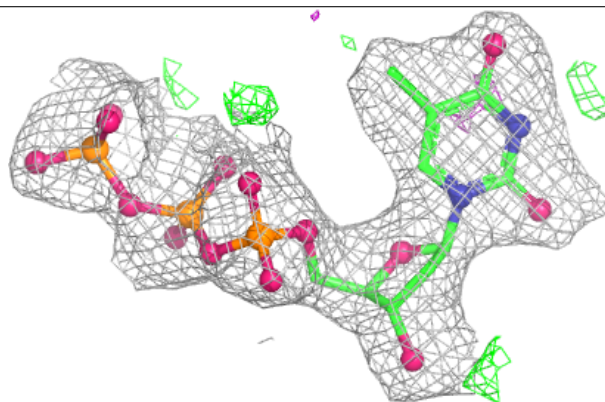


Electron density around TTP F 3511:

$2mF_o - DF_c$ (at 0.7 rmsd) in gray
 $mF_o - DF_c$ (at 3 rmsd) in purple (negative)
and green (positive)

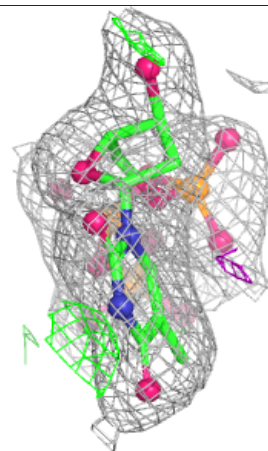
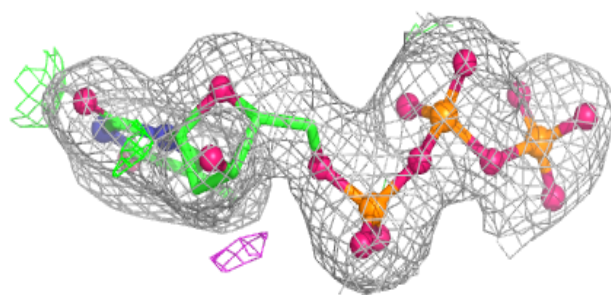
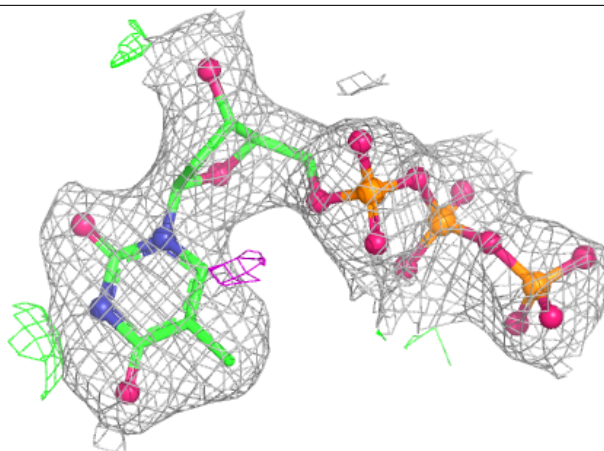
**Electron density around TTP B 3503:**

$2mF_o - DF_c$ (at 0.7 rmsd) in gray
 $mF_o - DF_c$ (at 3 rmsd) in purple (negative)
and green (positive)



Electron density around TTP E 3509:

$2mF_o-DF_c$ (at 0.7 rmsd) in gray
 mF_o-DF_c (at 3 rmsd) in purple (negative)
and green (positive)



6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.