



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2026 – 05:45 AM EDT

PDB ID : 7MHL / pdb_00007mhl
Title : Ensemble refinement structure of SARS-CoV-2 main protease (Mpro) at 100 K
Authors : Ebrahim, A.; Riley, B.T.; Kumaran, D.; Andi, B.; Fuchs, M.R.; McSweeney, S.; Keedy, D.A.
Deposited on : 2021-04-15
Resolution : 1.55 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	:	FAILED
Mogul	:	2022.3.0, CSD as543be (2022)
Xtriage (Phenix)	:	2.0
EDS	:	3.0
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

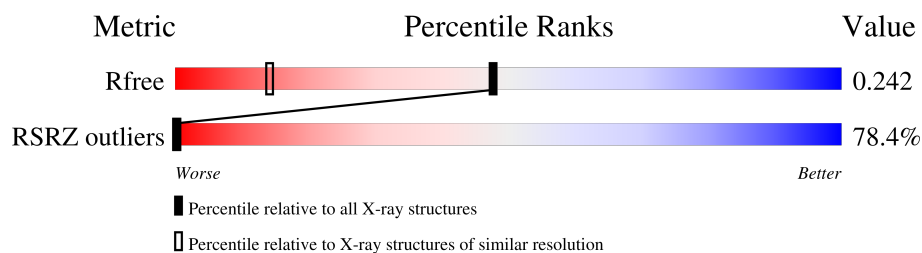
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 1.55 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	2145 (1.56-1.56)
RSRZ outliers	180081	2146 (1.56-1.56)

MolProbity failed to run properly - the sequence quality summary graphics cannot be shown.

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

Mol	Type	Chain	Res	Chirality	Geometry	Clashes	Electron density
2	DMS	1-A	403	-	-	-	X
2	DMS	1-A	404	-	-	-	X
2	DMS	12-A	402	-	X	-	-
2	DMS	18-A	402	-	X	-	-
2	DMS	27-A	404	-	X	-	-
2	DMS	4-A	405	-	X	-	-
2	DMS	9-A	403	-	X	-	-
2	DMS	9-A	405	-	X	-	-

2 Entry composition

There are 4 unique types of molecules in this entry. The entry contains 264643 atoms, of which 126576 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 3C-like proteinase.

Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf	Trace
1	1-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	2-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	3-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	4-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	5-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	6-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	7-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	8-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	9-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	10-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	11-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	12-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	13-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	14-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	15-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	16-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			

Continued on next page...

Continued from previous page...

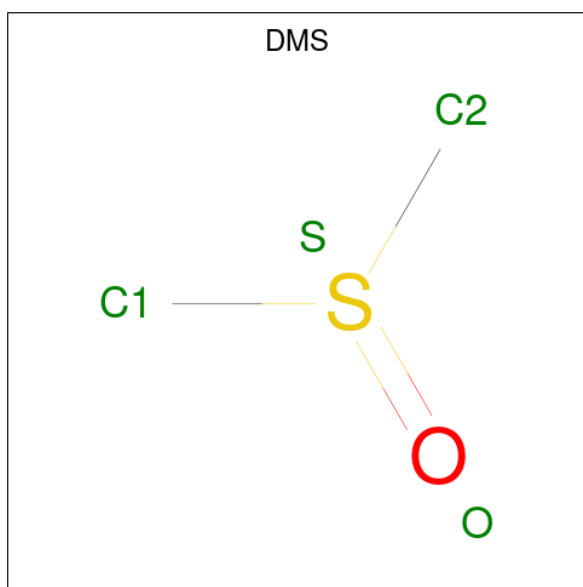
Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf	Trace
1	17-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	18-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	19-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	20-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	21-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	22-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	23-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	24-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	25-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	26-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	27-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	28-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	29-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	30-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	31-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	32-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	33-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	34-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	35-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	36-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	37-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf	Trace
1	38-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	39-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	40-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	41-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	42-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	43-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	44-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	45-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	46-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	47-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	48-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	49-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	50-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	51-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	52-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	53-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	54-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			

- Molecule 2 is DIMETHYL SULFOXIDE (CCD ID: DMS) (formula: C₂H₆OS).



Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	1-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	2-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	3-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	4-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	5-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	6-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	7-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	8-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	9-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	10-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	11-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	12-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	13-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	14-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	15-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	16-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	17-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	18-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	19-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	20-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	21-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	22-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	23-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	24-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	25-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	26-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	27-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	28-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	29-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	30-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	31-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	32-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	33-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	34-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	35-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	36-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	37-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	38-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	39-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	40-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	41-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	42-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	43-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	44-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	45-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	46-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	47-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	48-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	49-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	50-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	51-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	52-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	53-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	54-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	1-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	2-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	3-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	4-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	5-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	6-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	7-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	8-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	9-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	10-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	11-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	12-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	13-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	14-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	15-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	16-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	17-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	18-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	19-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	20-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	21-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	22-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	23-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	24-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	25-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	26-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	27-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	28-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	29-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	30-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	31-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	32-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	33-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	34-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	35-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	36-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	37-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	38-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	39-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	40-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	41-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	42-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	43-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	44-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	45-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	46-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	47-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	48-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	49-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	50-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	51-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	52-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	53-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	54-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	1-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	2-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	3-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	4-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	5-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	6-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	7-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	8-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	9-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	10-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	11-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	12-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	13-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	14-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	15-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	16-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	17-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	18-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	19-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	20-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	21-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	22-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	23-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	24-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	25-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	26-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	27-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	28-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	29-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	30-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	31-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	32-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	33-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	34-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	35-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	36-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	37-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	38-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	39-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	40-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	41-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	42-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	43-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	44-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	45-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	46-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	47-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	48-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	49-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	50-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	51-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	52-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	53-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	54-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	1-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	2-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	3-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	4-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	5-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	6-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	7-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	8-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	9-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	10-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	11-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	12-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	13-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	14-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	15-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	16-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	17-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	18-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	19-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	20-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	21-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	22-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	23-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	24-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	25-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	26-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	27-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	28-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	29-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	30-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	31-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	32-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	33-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	34-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	35-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	36-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	37-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	38-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	39-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	40-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	41-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	42-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	43-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	44-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	45-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	46-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	47-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	48-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	49-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	50-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	51-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	52-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	53-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	54-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	1-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	2-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	3-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	4-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	5-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	6-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	7-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	8-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	9-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	10-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	11-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	12-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	13-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	14-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	15-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	16-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	17-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	18-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	19-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	20-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	21-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	22-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	23-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	24-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	25-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	26-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	27-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	28-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	29-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	30-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	31-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	32-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	33-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	34-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	35-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	36-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	37-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	38-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	39-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	40-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	41-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	42-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	43-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	44-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	45-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	46-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	47-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	48-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	49-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	50-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	51-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	52-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	53-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	54-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

- Molecule 3 is ZINC ION (CCD ID: ZN) (formula: Zn).

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	1-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	2-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	3-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	4-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	5-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	6-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	7-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	8-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	9-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	10-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	11-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	12-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	13-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	14-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	15-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	16-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	17-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	18-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	19-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	20-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	21-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	22-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	23-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	24-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	25-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	26-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	27-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	28-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	29-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	30-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	31-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	32-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	33-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	34-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	35-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	36-A	1	Total 1	Zn 1	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	37-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	38-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	39-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	40-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	41-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	42-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	43-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	44-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	45-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	46-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	47-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	48-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	49-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	50-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	51-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	52-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	53-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	54-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		

- Molecule 4 is water.

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
4	1-A	190	Total	O	0	0
			190	190		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
4	2-A	172	Total 172	O 172	0	0
4	3-A	162	Total 162	O 162	0	0
4	4-A	157	Total 157	O 157	0	0
4	5-A	164	Total 164	O 164	0	0
4	6-A	181	Total 181	O 181	0	0
4	7-A	173	Total 173	O 173	0	0
4	8-A	177	Total 177	O 177	0	0
4	9-A	174	Total 174	O 174	0	0
4	10-A	168	Total 168	O 168	0	0
4	11-A	164	Total 164	O 164	0	0
4	12-A	195	Total 195	O 195	0	0
4	13-A	196	Total 196	O 196	0	0
4	14-A	152	Total 152	O 152	0	0
4	15-A	164	Total 164	O 164	0	0
4	16-A	166	Total 166	O 166	0	0
4	17-A	176	Total 176	O 176	0	0
4	18-A	177	Total 177	O 177	0	0
4	19-A	160	Total 160	O 160	0	0
4	20-A	161	Total 161	O 161	0	0
4	21-A	179	Total 179	O 179	0	0
4	22-A	175	Total 175	O 175	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
4	23-A	170	Total 170	O 170	0	0
4	24-A	164	Total 164	O 164	0	0
4	25-A	166	Total 166	O 166	0	0
4	26-A	178	Total 178	O 178	0	0
4	27-A	181	Total 181	O 181	0	0
4	28-A	167	Total 167	O 167	0	0
4	29-A	158	Total 158	O 158	0	0
4	30-A	170	Total 170	O 170	0	0
4	31-A	183	Total 183	O 183	0	0
4	32-A	169	Total 169	O 169	0	0
4	33-A	181	Total 181	O 181	0	0
4	34-A	182	Total 182	O 182	0	0
4	35-A	165	Total 165	O 165	0	0
4	36-A	165	Total 165	O 165	0	0
4	37-A	169	Total 169	O 169	0	0
4	38-A	170	Total 170	O 170	0	0
4	39-A	182	Total 182	O 182	0	0
4	40-A	172	Total 172	O 172	0	0
4	41-A	158	Total 158	O 158	0	0
4	42-A	163	Total 163	O 163	0	0
4	43-A	164	Total 164	O 164	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
4	44-A	172	Total 172	O 172	0	0
4	45-A	150	Total 150	O 150	0	0
4	46-A	162	Total 162	O 162	0	0
4	47-A	152	Total 152	O 152	0	0
4	48-A	151	Total 151	O 151	0	0
4	49-A	145	Total 145	O 145	0	0
4	50-A	185	Total 185	O 185	0	0
4	51-A	168	Total 168	O 168	0	0
4	52-A	151	Total 151	O 151	0	0
4	53-A	145	Total 145	O 145	0	0
4	54-A	174	Total 174	O 174	0	0

MolProbity failed to run properly - this section is therefore empty.

3 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	C 1 2 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	113.71Å 53.32Å 44.57Å 90.00° 102.96° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	48.05 – 1.55 48.05 – 1.55	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	99.7 (48.05-1.55) 97.9 (48.05-1.55)	Depositor EDS
R_{merge}	0.16	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	1.02 (at 1.55Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX (phenix.ensemble_refinement:1.19.2_4158)	Depositor
R, R_{free}	0.166 , 0.227 0.179 , 0.242	Depositor DCC
R_{free} test set	1906 reflections (5.01%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	15.2	Xtriage
Anisotropy	0.055	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.01 , 17.8	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.50$, $\langle L^2 \rangle = 0.33$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.86	EDS
Total number of atoms	264643	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	17.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 10.27% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

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.

4 Model quality [i](#)

4.1 Standard geometry [i](#)

MolProbity failed to run properly - this section is therefore empty.

4.2 Too-close contacts [i](#)

MolProbity failed to run properly - this section is therefore empty.

4.3 Torsion angles [i](#)

4.3.1 Protein backbone [i](#)

MolProbity failed to run properly - this section is therefore empty.

4.3.2 Protein sidechains [i](#)

MolProbity failed to run properly - this section is therefore empty.

4.3.3 RNA [i](#)

MolProbity failed to run properly - this section is therefore empty.

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

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

4.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

4.6 Ligand geometry [i](#)

Of 324 ligands modelled in this entry, 54 are monoatomic - leaving 270 for Mogul analysis.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds (or angles) for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds (or angles) that are observed in the model and the number of bonds (or angles) that are defined in the Chemical Component Dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond

length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	$\# Z > 2$	Counts	RMSZ	$\# Z > 2$
2	DMS	3-A	401	-	3,3,3	0.56	0	3,3,3	0.34	0
2	DMS	7-A	401	-	3,3,3	0.59	0	3,3,3	0.43	0
2	DMS	31-A	404	-	3,3,3	0.56	0	3,3,3	0.67	0
2	DMS	53-A	405	-	3,3,3	0.97	0	3,3,3	2.16	1 (33%)
2	DMS	4-A	402	-	3,3,3	0.74	0	3,3,3	1.32	0
2	DMS	28-A	405	-	3,3,3	0.80	0	3,3,3	1.65	1 (33%)
2	DMS	38-A	401	-	3,3,3	0.46	0	3,3,3	1.35	1 (33%)
2	DMS	42-A	403	-	3,3,3	0.68	0	3,3,3	0.77	0
2	DMS	53-A	401	-	3,3,3	0.53	0	3,3,3	0.97	0
2	DMS	43-A	404	-	3,3,3	0.57	0	3,3,3	1.95	1 (33%)
2	DMS	51-A	401	-	3,3,3	0.46	0	3,3,3	0.65	0
2	DMS	17-A	403	-	3,3,3	0.78	0	3,3,3	1.32	1 (33%)
2	DMS	6-A	405	-	3,3,3	0.73	0	3,3,3	1.65	0
2	DMS	49-A	402	-	3,3,3	0.74	0	3,3,3	0.97	0
2	DMS	54-A	403	-	3,3,3	0.73	0	3,3,3	0.97	0
2	DMS	18-A	405	-	3,3,3	0.77	0	3,3,3	0.63	0
2	DMS	20-A	403	-	3,3,3	0.82	0	3,3,3	1.19	0
2	DMS	27-A	402	-	3,3,3	0.67	0	3,3,3	1.15	0
2	DMS	32-A	404	-	3,3,3	0.82	0	3,3,3	0.77	0
2	DMS	3-A	402	-	3,3,3	0.81	0	3,3,3	0.78	0
2	DMS	17-A	402	-	3,3,3	0.74	0	3,3,3	1.10	0
2	DMS	11-A	403	-	3,3,3	0.78	0	3,3,3	0.11	0
2	DMS	31-A	405	-	3,3,3	0.90	0	3,3,3	1.77	1 (33%)
2	DMS	1-A	404	-	3,3,3	0.92	0	3,3,3	1.75	0
2	DMS	46-A	401	-	3,3,3	0.51	0	3,3,3	0.78	0
2	DMS	21-A	404	-	3,3,3	0.83	0	3,3,3	0.38	0
2	DMS	44-A	401	-	3,3,3	0.48	0	3,3,3	1.75	1 (33%)
2	DMS	38-A	402	-	3,3,3	0.82	0	3,3,3	1.16	0
2	DMS	15-A	404	-	3,3,3	0.69	0	3,3,3	1.83	1 (33%)
2	DMS	51-A	405	-	3,3,3	0.78	0	3,3,3	1.59	1 (33%)
2	DMS	42-A	402	-	3,3,3	0.92	0	3,3,3	1.00	0
2	DMS	12-A	405	-	3,3,3	0.64	0	3,3,3	1.05	0
2	DMS	45-A	402	-	3,3,3	0.62	0	3,3,3	1.09	0
2	DMS	15-A	403	-	3,3,3	0.90	0	3,3,3	1.28	0
2	DMS	53-A	403	-	3,3,3	0.71	0	3,3,3	2.37	1 (33%)
2	DMS	14-A	402	-	3,3,3	0.88	0	3,3,3	0.70	0
2	DMS	22-A	405	-	3,3,3	0.63	0	3,3,3	1.18	0

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
2	DMS	41-A	402	-	3,3,3	0.82	0	3,3,3	0.80	0
2	DMS	54-A	404	-	3,3,3	0.76	0	3,3,3	1.26	0
2	DMS	35-A	404	-	3,3,3	0.65	0	3,3,3	0.67	0
2	DMS	24-A	401	-	3,3,3	0.70	0	3,3,3	0.76	0
2	DMS	49-A	404	-	3,3,3	0.89	0	3,3,3	2.17	1 (33%)
2	DMS	20-A	401	-	3,3,3	0.46	0	3,3,3	0.88	0
2	DMS	11-A	404	-	3,3,3	0.73	0	3,3,3	0.45	0
2	DMS	36-A	402	-	3,3,3	0.74	0	3,3,3	2.11	2 (66%)
2	DMS	48-A	403	-	3,3,3	0.66	0	3,3,3	1.11	0
2	DMS	15-A	405	-	3,3,3	0.75	0	3,3,3	0.56	0
2	DMS	32-A	401	-	3,3,3	0.52	0	3,3,3	1.07	0
2	DMS	19-A	402	-	3,3,3	0.74	0	3,3,3	1.49	0
2	DMS	30-A	402	-	3,3,3	0.70	0	3,3,3	1.29	1 (33%)
2	DMS	47-A	405	-	3,3,3	0.80	0	3,3,3	0.29	0
2	DMS	40-A	402	-	3,3,3	0.77	0	3,3,3	0.83	0
2	DMS	34-A	404	-	3,3,3	0.67	0	3,3,3	1.91	1 (33%)
2	DMS	6-A	402	-	3,3,3	0.68	0	3,3,3	1.22	0
2	DMS	39-A	404	-	3,3,3	0.59	0	3,3,3	0.86	0
2	DMS	46-A	404	-	3,3,3	0.66	0	3,3,3	1.20	0
2	DMS	45-A	404	-	3,3,3	0.80	0	3,3,3	0.81	0
2	DMS	27-A	404	-	3,3,3	0.62	0	3,3,3	3.05	3 (100%)
2	DMS	2-A	402	-	3,3,3	0.58	0	3,3,3	0.73	0
2	DMS	39-A	405	-	3,3,3	0.84	0	3,3,3	1.03	0
2	DMS	40-A	405	-	3,3,3	0.93	0	3,3,3	1.56	1 (33%)
2	DMS	32-A	403	-	3,3,3	0.78	0	3,3,3	0.80	0
2	DMS	45-A	403	-	3,3,3	0.70	0	3,3,3	1.28	0
2	DMS	9-A	404	-	3,3,3	0.61	0	3,3,3	0.49	0
2	DMS	19-A	404	-	3,3,3	0.68	0	3,3,3	2.34	2 (66%)
2	DMS	26-A	401	-	3,3,3	0.51	0	3,3,3	1.04	0
2	DMS	4-A	405	-	3,3,3	0.69	0	3,3,3	3.17	3 (100%)
2	DMS	21-A	401	-	3,3,3	0.37	0	3,3,3	1.10	0
2	DMS	36-A	404	-	3,3,3	0.68	0	3,3,3	1.44	0
2	DMS	38-A	405	-	3,3,3	0.87	0	3,3,3	0.56	0
2	DMS	37-A	401	-	3,3,3	0.43	0	3,3,3	0.23	0
2	DMS	36-A	403	-	3,3,3	0.81	0	3,3,3	0.90	0
2	DMS	34-A	402	-	3,3,3	0.69	0	3,3,3	1.51	1 (33%)
2	DMS	3-A	405	-	3,3,3	0.70	0	3,3,3	1.23	0
2	DMS	54-A	405	-	3,3,3	0.85	0	3,3,3	2.21	2 (66%)
2	DMS	37-A	402	-	3,3,3	0.86	0	3,3,3	0.24	0
2	DMS	2-A	405	-	3,3,3	0.66	0	3,3,3	0.94	0
2	DMS	37-A	403	-	3,3,3	0.72	0	3,3,3	0.42	0

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
2	DMS	17-A	405	-	3,3,3	0.74	0	3,3,3	2.35	2 (66%)
2	DMS	9-A	405	-	3,3,3	0.80	0	3,3,3	3.26	3 (100%)
2	DMS	21-A	402	-	3,3,3	0.75	0	3,3,3	1.37	0
2	DMS	10-A	405	-	3,3,3	0.77	0	3,3,3	0.72	0
2	DMS	19-A	401	-	3,3,3	0.45	0	3,3,3	0.24	0
2	DMS	29-A	404	-	3,3,3	0.75	0	3,3,3	1.13	0
2	DMS	33-A	403	-	3,3,3	0.60	0	3,3,3	1.16	0
2	DMS	12-A	404	-	3,3,3	0.83	0	3,3,3	0.73	0
2	DMS	28-A	403	-	3,3,3	0.83	0	3,3,3	0.79	0
2	DMS	17-A	401	-	3,3,3	0.57	0	3,3,3	1.10	0
2	DMS	47-A	404	-	3,3,3	0.64	0	3,3,3	1.08	0
2	DMS	39-A	401	-	3,3,3	0.46	0	3,3,3	0.50	0
2	DMS	22-A	402	-	3,3,3	0.67	0	3,3,3	1.33	0
2	DMS	46-A	403	-	3,3,3	0.66	0	3,3,3	0.84	0
2	DMS	46-A	405	-	3,3,3	0.81	0	3,3,3	0.52	0
2	DMS	24-A	402	-	3,3,3	0.75	0	3,3,3	1.08	0
2	DMS	41-A	404	-	3,3,3	0.77	0	3,3,3	1.10	0
2	DMS	16-A	404	-	3,3,3	0.71	0	3,3,3	1.38	1 (33%)
2	DMS	54-A	401	-	3,3,3	0.48	0	3,3,3	0.39	0
2	DMS	19-A	405	-	3,3,3	0.70	0	3,3,3	0.65	0
2	DMS	18-A	401	-	3,3,3	0.42	0	3,3,3	0.59	0
2	DMS	35-A	401	-	3,3,3	0.49	0	3,3,3	0.76	0
2	DMS	9-A	402	-	3,3,3	0.71	0	3,3,3	1.66	1 (33%)
2	DMS	13-A	401	-	3,3,3	0.66	0	3,3,3	1.14	0
2	DMS	4-A	404	-	3,3,3	0.68	0	3,3,3	0.32	0
2	DMS	10-A	402	-	3,3,3	0.65	0	3,3,3	1.96	1 (33%)
2	DMS	30-A	403	-	3,3,3	0.69	0	3,3,3	0.57	0
2	DMS	42-A	401	-	3,3,3	0.52	0	3,3,3	0.92	0
2	DMS	18-A	403	-	3,3,3	0.65	0	3,3,3	0.61	0
2	DMS	25-A	405	-	3,3,3	0.58	0	3,3,3	1.32	0
2	DMS	5-A	401	-	3,3,3	0.72	0	3,3,3	0.97	0
2	DMS	25-A	401	-	3,3,3	0.47	0	3,3,3	0.56	0
2	DMS	6-A	401	-	3,3,3	0.84	0	3,3,3	1.47	0
2	DMS	13-A	403	-	3,3,3	0.75	0	3,3,3	1.16	0
2	DMS	8-A	404	-	3,3,3	0.63	0	3,3,3	1.34	0
2	DMS	14-A	401	-	3,3,3	0.52	0	3,3,3	1.08	0
2	DMS	52-A	404	-	3,3,3	0.68	0	3,3,3	1.86	1 (33%)
2	DMS	9-A	401	-	3,3,3	0.56	0	3,3,3	0.89	0
2	DMS	21-A	405	-	3,3,3	0.63	0	3,3,3	2.39	2 (66%)
2	DMS	30-A	405	-	3,3,3	0.68	0	3,3,3	0.39	0
2	DMS	28-A	404	-	3,3,3	0.88	0	3,3,3	0.34	0

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
2	DMS	29-A	401	-	3,3,3	0.35	0	3,3,3	0.86	0
2	DMS	6-A	403	-	3,3,3	0.70	0	3,3,3	2.13	1 (33%)
2	DMS	7-A	402	-	3,3,3	0.82	0	3,3,3	0.66	0
2	DMS	10-A	404	-	3,3,3	0.76	0	3,3,3	2.53	1 (33%)
2	DMS	15-A	401	-	3,3,3	0.42	0	3,3,3	0.64	0
2	DMS	5-A	402	-	3,3,3	0.60	0	3,3,3	1.78	1 (33%)
2	DMS	33-A	405	-	3,3,3	0.88	0	3,3,3	1.73	0
2	DMS	41-A	401	-	3,3,3	0.46	0	3,3,3	1.63	1 (33%)
2	DMS	31-A	401	-	3,3,3	0.41	0	3,3,3	1.12	0
2	DMS	11-A	402	-	3,3,3	0.85	0	3,3,3	1.92	1 (33%)
2	DMS	33-A	401	-	3,3,3	0.45	0	3,3,3	0.67	0
2	DMS	31-A	403	-	3,3,3	0.72	0	3,3,3	0.76	0
2	DMS	16-A	401	-	3,3,3	0.94	0	3,3,3	1.81	1 (33%)
2	DMS	26-A	403	-	3,3,3	0.82	0	3,3,3	1.00	0
2	DMS	8-A	405	-	3,3,3	0.66	0	3,3,3	1.86	2 (66%)
2	DMS	28-A	402	-	3,3,3	0.79	0	3,3,3	1.50	1 (33%)
2	DMS	29-A	402	-	3,3,3	0.78	0	3,3,3	0.75	0
2	DMS	51-A	403	-	3,3,3	0.72	0	3,3,3	0.83	0
2	DMS	43-A	401	-	3,3,3	0.77	0	3,3,3	0.65	0
2	DMS	5-A	404	-	3,3,3	1.09	0	3,3,3	1.59	0
2	DMS	46-A	402	-	3,3,3	0.73	0	3,3,3	0.74	0
2	DMS	42-A	404	-	3,3,3	0.89	0	3,3,3	0.83	0
2	DMS	38-A	403	-	3,3,3	0.68	0	3,3,3	0.96	0
2	DMS	12-A	401	-	3,3,3	0.57	0	3,3,3	0.89	0
2	DMS	34-A	405	-	3,3,3	0.69	0	3,3,3	0.72	0
2	DMS	44-A	402	-	3,3,3	0.77	0	3,3,3	0.57	0
2	DMS	20-A	402	-	3,3,3	0.80	0	3,3,3	1.19	0
2	DMS	52-A	402	-	3,3,3	0.67	0	3,3,3	0.88	0
2	DMS	27-A	403	-	3,3,3	0.73	0	3,3,3	0.72	0
2	DMS	24-A	404	-	3,3,3	0.73	0	3,3,3	0.84	0
2	DMS	45-A	405	-	3,3,3	0.64	0	3,3,3	1.01	0
2	DMS	33-A	402	-	3,3,3	0.87	0	3,3,3	0.84	0
2	DMS	7-A	403	-	3,3,3	0.66	0	3,3,3	2.08	1 (33%)
2	DMS	45-A	401	-	3,3,3	0.74	0	3,3,3	3.45	2 (66%)
2	DMS	48-A	402	-	3,3,3	0.54	0	3,3,3	0.94	0
2	DMS	23-A	403	-	3,3,3	0.57	0	3,3,3	1.09	0
2	DMS	40-A	401	-	3,3,3	0.50	0	3,3,3	0.32	0
2	DMS	47-A	403	-	3,3,3	0.90	0	3,3,3	0.91	0
2	DMS	34-A	401	-	3,3,3	0.74	0	3,3,3	0.94	0
2	DMS	8-A	402	-	3,3,3	0.63	0	3,3,3	1.61	0
2	DMS	4-A	401	-	3,3,3	0.81	0	3,3,3	1.13	0

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
2	DMS	12-A	402	-	3,3,3	0.68	0	3,3,3	3.20	3 (100%)
2	DMS	30-A	404	-	3,3,3	0.71	0	3,3,3	0.91	0
2	DMS	42-A	405	-	3,3,3	0.83	0	3,3,3	0.74	0
2	DMS	10-A	401	-	3,3,3	0.88	0	3,3,3	1.45	1 (33%)
2	DMS	35-A	403	-	3,3,3	0.77	0	3,3,3	1.21	0
2	DMS	39-A	403	-	3,3,3	0.64	0	3,3,3	0.89	0
2	DMS	40-A	403	-	3,3,3	0.75	0	3,3,3	0.87	0
2	DMS	49-A	403	-	3,3,3	0.66	0	3,3,3	1.04	0
2	DMS	24-A	405	-	3,3,3	0.74	0	3,3,3	2.09	2 (66%)
2	DMS	49-A	405	-	3,3,3	0.56	0	3,3,3	1.30	0
2	DMS	27-A	405	-	3,3,3	0.74	0	3,3,3	0.97	0
2	DMS	49-A	401	-	3,3,3	0.44	0	3,3,3	0.34	0
2	DMS	4-A	403	-	3,3,3	0.80	0	3,3,3	0.37	0
2	DMS	51-A	402	-	3,3,3	0.82	0	3,3,3	1.93	1 (33%)
2	DMS	44-A	403	-	3,3,3	0.70	0	3,3,3	1.66	1 (33%)
2	DMS	33-A	404	-	3,3,3	0.43	0	3,3,3	2.39	1 (33%)
2	DMS	8-A	401	-	3,3,3	0.44	0	3,3,3	0.43	0
2	DMS	52-A	403	-	3,3,3	0.44	0	3,3,3	2.06	1 (33%)
2	DMS	5-A	405	-	3,3,3	0.68	0	3,3,3	0.61	0
2	DMS	6-A	404	-	3,3,3	0.80	0	3,3,3	1.21	0
2	DMS	29-A	405	-	3,3,3	0.66	0	3,3,3	1.92	1 (33%)
2	DMS	5-A	403	-	3,3,3	0.74	0	3,3,3	1.65	1 (33%)
2	DMS	23-A	405	-	3,3,3	0.51	0	3,3,3	1.71	2 (66%)
2	DMS	3-A	403	-	3,3,3	0.72	0	3,3,3	1.56	1 (33%)
2	DMS	1-A	401	-	3,3,3	0.50	0	3,3,3	0.41	0
2	DMS	24-A	403	-	3,3,3	0.87	0	3,3,3	0.74	0
2	DMS	2-A	401	-	3,3,3	0.58	0	3,3,3	0.29	0
2	DMS	16-A	402	-	3,3,3	0.74	0	3,3,3	2.06	1 (33%)
2	DMS	44-A	405	-	3,3,3	0.69	0	3,3,3	1.34	0
2	DMS	16-A	405	-	3,3,3	0.60	0	3,3,3	1.79	1 (33%)
2	DMS	29-A	403	-	3,3,3	0.76	0	3,3,3	0.44	0
2	DMS	25-A	403	-	3,3,3	0.81	0	3,3,3	0.81	0
2	DMS	36-A	401	-	3,3,3	0.46	0	3,3,3	0.47	0
2	DMS	21-A	403	-	3,3,3	0.74	0	3,3,3	1.14	0
2	DMS	39-A	402	-	3,3,3	0.70	0	3,3,3	1.18	1 (33%)
2	DMS	43-A	403	-	3,3,3	0.71	0	3,3,3	0.84	0
2	DMS	20-A	405	-	3,3,3	0.76	0	3,3,3	1.97	1 (33%)
2	DMS	30-A	401	-	3,3,3	0.50	0	3,3,3	0.23	0
2	DMS	1-A	402	-	3,3,3	0.75	0	3,3,3	0.32	0

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
2	DMS	13-A	405	-	3,3,3	0.76	0	3,3,3	0.88	0
2	DMS	11-A	405	-	3,3,3	0.84	0	3,3,3	0.67	0
2	DMS	48-A	405	-	3,3,3	0.91	0	3,3,3	1.59	1 (33%)
2	DMS	14-A	403	-	3,3,3	0.66	0	3,3,3	1.44	0
2	DMS	19-A	403	-	3,3,3	0.67	0	3,3,3	0.85	0
2	DMS	12-A	403	-	3,3,3	0.78	0	3,3,3	0.40	0
2	DMS	28-A	401	-	3,3,3	0.36	0	3,3,3	1.48	0
2	DMS	50-A	401	-	3,3,3	0.37	0	3,3,3	0.38	0
2	DMS	54-A	402	-	3,3,3	0.55	0	3,3,3	1.95	1 (33%)
2	DMS	18-A	402	-	3,3,3	0.60	0	3,3,3	3.15	3 (100%)
2	DMS	35-A	402	-	3,3,3	0.63	0	3,3,3	1.80	1 (33%)
2	DMS	23-A	402	-	3,3,3	0.69	0	3,3,3	1.00	0
2	DMS	7-A	404	-	3,3,3	0.72	0	3,3,3	0.80	0
2	DMS	40-A	404	-	3,3,3	0.76	0	3,3,3	1.16	0
2	DMS	32-A	405	-	3,3,3	0.71	0	3,3,3	1.78	1 (33%)
2	DMS	23-A	401	-	3,3,3	0.49	0	3,3,3	0.41	0
2	DMS	52-A	405	-	3,3,3	0.82	0	3,3,3	0.86	0
2	DMS	13-A	402	-	3,3,3	0.70	0	3,3,3	1.37	1 (33%)
2	DMS	8-A	403	-	3,3,3	0.74	0	3,3,3	1.54	1 (33%)
2	DMS	35-A	405	-	3,3,3	0.76	0	3,3,3	0.80	0
2	DMS	14-A	404	-	3,3,3	0.81	0	3,3,3	1.47	1 (33%)
2	DMS	11-A	401	-	3,3,3	0.84	0	3,3,3	1.53	1 (33%)
2	DMS	25-A	402	-	3,3,3	0.80	0	3,3,3	0.20	0
2	DMS	53-A	402	-	3,3,3	0.64	0	3,3,3	1.16	0
2	DMS	50-A	402	-	3,3,3	0.82	0	3,3,3	1.10	0
2	DMS	34-A	403	-	3,3,3	0.80	0	3,3,3	0.34	0
2	DMS	43-A	405	-	3,3,3	0.98	0	3,3,3	1.74	1 (33%)
2	DMS	26-A	404	-	3,3,3	0.65	0	3,3,3	0.52	0
2	DMS	50-A	403	-	3,3,3	0.81	0	3,3,3	0.72	0
2	DMS	7-A	405	-	3,3,3	0.94	0	3,3,3	0.47	0
2	DMS	18-A	404	-	3,3,3	0.75	0	3,3,3	1.98	1 (33%)
2	DMS	10-A	403	-	3,3,3	0.50	0	3,3,3	1.47	0
2	DMS	22-A	401	-	3,3,3	0.63	0	3,3,3	1.00	0
2	DMS	44-A	404	-	3,3,3	0.58	0	3,3,3	0.77	0
2	DMS	20-A	404	-	3,3,3	0.79	0	3,3,3	0.94	0
2	DMS	37-A	404	-	3,3,3	0.63	0	3,3,3	0.94	0
2	DMS	14-A	405	-	3,3,3	0.55	0	3,3,3	2.11	1 (33%)
2	DMS	38-A	404	-	3,3,3	0.69	0	3,3,3	1.08	0
2	DMS	13-A	404	-	3,3,3	0.83	0	3,3,3	1.18	0
2	DMS	48-A	401	-	3,3,3	0.47	0	3,3,3	0.62	0

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
2	DMS	48-A	404	-	3,3,3	0.68	0	3,3,3	1.81	2 (66%)
2	DMS	3-A	404	-	3,3,3	0.69	0	3,3,3	0.64	0
2	DMS	47-A	401	-	3,3,3	0.59	0	3,3,3	0.91	0
2	DMS	25-A	404	-	3,3,3	0.74	0	3,3,3	1.11	0
2	DMS	26-A	405	-	3,3,3	0.70	0	3,3,3	2.35	2 (66%)
2	DMS	2-A	404	-	3,3,3	0.55	0	3,3,3	1.38	1 (33%)
2	DMS	23-A	404	-	3,3,3	0.80	0	3,3,3	1.33	0
2	DMS	22-A	403	-	3,3,3	0.66	0	3,3,3	1.13	0
2	DMS	17-A	404	-	3,3,3	0.82	0	3,3,3	1.21	0
2	DMS	50-A	404	-	3,3,3	0.77	0	3,3,3	1.28	0
2	DMS	1-A	403	-	3,3,3	0.69	0	3,3,3	0.44	0
2	DMS	1-A	405	-	3,3,3	0.71	0	3,3,3	2.59	2 (66%)
2	DMS	36-A	405	-	3,3,3	0.66	0	3,3,3	1.39	0
2	DMS	31-A	402	-	3,3,3	0.86	0	3,3,3	1.04	0
2	DMS	32-A	402	-	3,3,3	0.80	0	3,3,3	1.03	0
2	DMS	2-A	403	-	3,3,3	0.80	0	3,3,3	1.84	1 (33%)
2	DMS	37-A	405	-	3,3,3	0.71	0	3,3,3	1.43	1 (33%)
2	DMS	41-A	405	-	3,3,3	0.71	0	3,3,3	1.52	0
2	DMS	43-A	402	-	3,3,3	0.81	0	3,3,3	0.83	0
2	DMS	9-A	403	-	3,3,3	0.60	0	3,3,3	3.21	3 (100%)
2	DMS	52-A	401	-	3,3,3	0.41	0	3,3,3	0.93	0
2	DMS	53-A	404	-	3,3,3	0.69	0	3,3,3	1.24	0
2	DMS	15-A	402	-	3,3,3	0.90	0	3,3,3	0.45	0
2	DMS	51-A	404	-	3,3,3	0.81	0	3,3,3	1.20	0
2	DMS	47-A	402	-	3,3,3	0.83	0	3,3,3	1.10	0
2	DMS	16-A	403	-	3,3,3	0.69	0	3,3,3	1.31	0
2	DMS	50-A	405	-	3,3,3	0.88	0	3,3,3	1.55	1 (33%)
2	DMS	26-A	402	-	3,3,3	0.73	0	3,3,3	0.31	0
2	DMS	22-A	404	-	3,3,3	0.76	0	3,3,3	3.18	2 (66%)
2	DMS	27-A	401	-	3,3,3	0.65	0	3,3,3	1.63	1 (33%)
2	DMS	41-A	403	-	3,3,3	0.65	0	3,3,3	0.76	0

There are no bond length outliers.

All (99) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	45-A	401	DMS	O-S-C1	4.56	129.32	106.49
2	10-A	404	DMS	O-S-C1	-4.35	84.71	106.49
2	22-A	404	DMS	O-S-C1	4.29	127.94	106.49
2	9-A	403	DMS	O-S-C1	4.23	127.65	106.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	9-A	405	DMS	O-S-C1	3.93	126.17	106.49
2	18-A	402	DMS	O-S-C2	3.68	124.89	106.49
2	12-A	402	DMS	O-S-C1	3.65	124.74	106.49
2	1-A	405	DMS	O-S-C1	3.63	124.69	106.49
2	53-A	403	DMS	O-S-C1	3.63	124.67	106.49
2	14-A	405	DMS	O-S-C2	3.57	124.34	106.49
2	4-A	405	DMS	C2-S-C1	3.56	116.69	98.42
2	33-A	404	DMS	O-S-C1	3.54	124.21	106.49
2	49-A	404	DMS	O-S-C1	3.49	123.95	106.49
2	45-A	401	DMS	O-S-C2	3.43	123.64	106.49
2	27-A	404	DMS	O-S-C1	3.42	123.61	106.49
2	52-A	403	DMS	O-S-C1	3.40	123.50	106.49
2	4-A	405	DMS	O-S-C2	3.38	123.40	106.49
2	16-A	402	DMS	O-S-C2	3.34	123.22	106.49
2	9-A	405	DMS	O-S-C2	3.32	123.11	106.49
2	17-A	405	DMS	O-S-C2	3.32	123.09	106.49
2	10-A	402	DMS	O-S-C2	3.25	122.74	106.49
2	53-A	405	DMS	O-S-C2	-3.23	90.33	106.49
2	22-A	404	DMS	O-S-C2	3.14	122.19	106.49
2	16-A	405	DMS	O-S-C1	3.03	121.66	106.49
2	29-A	405	DMS	O-S-C2	3.02	121.61	106.49
2	36-A	402	DMS	O-S-C2	3.01	121.58	106.49
2	12-A	402	DMS	C2-S-C1	3.00	113.77	98.42
2	9-A	403	DMS	O-S-C2	2.98	121.40	106.49
2	43-A	404	DMS	O-S-C1	2.97	121.38	106.49
2	34-A	404	DMS	O-S-C2	2.97	121.38	106.49
2	20-A	405	DMS	O-S-C1	2.93	121.15	106.49
2	12-A	402	DMS	O-S-C2	2.92	121.12	106.49
2	54-A	405	DMS	O-S-C1	-2.90	91.98	106.49
2	31-A	405	DMS	O-S-C2	2.89	120.96	106.49
2	18-A	402	DMS	C2-S-C1	2.87	113.12	98.42
2	15-A	404	DMS	C2-S-C1	2.86	113.07	98.42
2	6-A	403	DMS	O-S-C2	2.86	120.80	106.49
2	27-A	404	DMS	C2-S-C1	2.86	113.05	98.42
2	27-A	404	DMS	O-S-C2	2.84	120.69	106.49
2	18-A	402	DMS	O-S-C1	2.83	120.68	106.49
2	52-A	404	DMS	O-S-C2	2.81	120.58	106.49
2	11-A	402	DMS	O-S-C1	2.81	120.56	106.49
2	26-A	405	DMS	O-S-C1	2.80	120.52	106.49
2	32-A	405	DMS	O-S-C2	2.78	120.39	106.49
2	21-A	405	DMS	O-S-C2	2.76	120.32	106.49
2	51-A	405	DMS	O-S-C1	2.75	120.24	106.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	26-A	405	DMS	C2-S-C1	2.70	112.23	98.42
2	40-A	405	DMS	O-S-C1	2.68	119.93	106.49
2	41-A	401	DMS	O-S-C2	2.67	119.83	106.49
2	21-A	405	DMS	C2-S-C1	2.64	111.97	98.42
2	7-A	403	DMS	O-S-C1	2.63	119.68	106.49
2	1-A	405	DMS	C2-S-C1	2.62	111.84	98.42
2	8-A	403	DMS	O-S-C1	2.61	119.55	106.49
2	16-A	401	DMS	O-S-C2	2.61	119.55	106.49
2	18-A	404	DMS	C2-S-C1	2.60	111.74	98.42
2	43-A	405	DMS	C2-S-C1	2.59	111.70	98.42
2	19-A	404	DMS	O-S-C1	2.57	119.33	106.49
2	51-A	402	DMS	C2-S-C1	2.56	111.56	98.42
2	27-A	401	DMS	O-S-C2	2.56	119.33	106.49
2	24-A	405	DMS	O-S-C1	2.54	119.22	106.49
2	5-A	403	DMS	O-S-C1	-2.53	93.86	106.49
2	19-A	404	DMS	C2-S-C1	2.53	111.36	98.42
2	24-A	405	DMS	O-S-C2	2.52	119.11	106.49
2	48-A	405	DMS	O-S-C2	2.52	119.09	106.49
2	2-A	403	DMS	C2-S-C1	2.47	111.10	98.42
2	4-A	405	DMS	O-S-C1	2.47	118.87	106.49
2	44-A	403	DMS	O-S-C1	2.46	118.83	106.49
2	11-A	401	DMS	O-S-C1	2.45	118.76	106.49
2	54-A	402	DMS	O-S-C2	2.39	118.45	106.49
2	34-A	402	DMS	O-S-C2	2.34	118.22	106.49
2	5-A	402	DMS	O-S-C1	2.33	118.17	106.49
2	9-A	405	DMS	C2-S-C1	2.32	110.30	98.42
2	48-A	404	DMS	O-S-C1	2.32	118.09	106.49
2	9-A	402	DMS	O-S-C1	2.31	118.05	106.49
2	8-A	405	DMS	O-S-C2	2.29	117.95	106.49
2	17-A	405	DMS	O-S-C1	2.28	117.89	106.49
2	44-A	401	DMS	O-S-C2	2.27	117.84	106.49
2	38-A	401	DMS	O-S-C2	2.26	117.81	106.49
2	2-A	404	DMS	O-S-C2	2.24	117.71	106.49
2	10-A	401	DMS	O-S-C2	2.22	117.61	106.49
2	30-A	402	DMS	O-S-C2	2.21	117.54	106.49
2	35-A	402	DMS	O-S-C2	2.21	117.53	106.49
2	8-A	405	DMS	C2-S-C1	-2.20	87.14	98.42
2	13-A	402	DMS	O-S-C1	2.16	117.31	106.49
2	16-A	404	DMS	O-S-C1	2.16	117.28	106.49
2	28-A	405	DMS	O-S-C2	-2.15	95.72	106.49
2	23-A	405	DMS	C2-S-C1	2.13	109.34	98.42
2	17-A	403	DMS	O-S-C2	-2.12	95.90	106.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	50-A	405	DMS	O-S-C1	-2.11	95.93	106.49
2	37-A	405	DMS	C2-S-C1	-2.09	87.72	98.42
2	28-A	402	DMS	C2-S-C1	2.09	109.11	98.42
2	54-A	405	DMS	O-S-C2	-2.08	96.10	106.49
2	14-A	404	DMS	O-S-C1	2.04	116.71	106.49
2	36-A	402	DMS	C2-S-C1	-2.03	88.01	98.42
2	23-A	405	DMS	O-S-C2	2.03	116.63	106.49
2	3-A	403	DMS	O-S-C2	2.03	116.63	106.49
2	9-A	403	DMS	C2-S-C1	2.02	108.77	98.42
2	39-A	402	DMS	O-S-C2	2.02	116.59	106.49
2	48-A	404	DMS	C2-S-C1	-2.01	88.13	98.42

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

4.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

4.8 Polymer linkage issues [i](#)

The following chains have linkage breaks:

Mol	Chain	Number of breaks
1	18-A	1
1	27-A	1
1	31-A	1
1	38-A	1
1	40-A	1
1	20-A	1
1	39-A	1

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
18	A	106:ILE	C	107:GLN	N	1.20
27	A	106:ILE	C	107:GLN	N	1.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
31	A	106:ILE	C	107:GLN	N	1.19
38	A	106:ILE	C	107:GLN	N	1.17
40	A	106:ILE	C	107:GLN	N	1.17
20	A	106:ILE	C	107:GLN	N	1.16
39	A	106:ILE	C	107:GLN	N	1.16

5 Fit of model and data ⓘ

5.1 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	1-A	306/306 (100%)	3.36	240 (78%) 0 0	0, 0, 0, 0	306 (100%)
1	2-A	0/306	-	-	-	-
1	3-A	0/306	-	-	-	-
1	4-A	0/306	-	-	-	-
1	5-A	0/306	-	-	-	-
1	6-A	0/306	-	-	-	-
1	7-A	0/306	-	-	-	-
1	8-A	0/306	-	-	-	-
1	9-A	0/306	-	-	-	-
1	10-A	0/306	-	-	-	-
1	11-A	0/306	-	-	-	-
1	12-A	0/306	-	-	-	-
1	13-A	0/306	-	-	-	-
1	14-A	0/306	-	-	-	-
1	15-A	0/306	-	-	-	-
1	16-A	0/306	-	-	-	-
1	17-A	0/306	-	-	-	-
1	18-A	0/306	-	-	-	-
1	19-A	0/306	-	-	-	-
1	20-A	0/306	-	-	-	-
1	21-A	0/306	-	-	-	-
1	22-A	0/306	-	-	-	-
1	23-A	0/306	-	-	-	-
1	24-A	0/306	-	-	-	-
1	25-A	0/306	-	-	-	-
1	26-A	0/306	-	-	-	-
1	27-A	0/306	-	-	-	-
1	28-A	0/306	-	-	-	-
1	29-A	0/306	-	-	-	-
1	30-A	0/306	-	-	-	-
1	31-A	0/306	-	-	-	-
1	32-A	0/306	-	-	-	-

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	33-A	0/306	-	-	-	-
1	34-A	0/306	-	-	-	-
1	35-A	0/306	-	-	-	-
1	36-A	0/306	-	-	-	-
1	37-A	0/306	-	-	-	-
1	38-A	0/306	-	-	-	-
1	39-A	0/306	-	-	-	-
1	40-A	0/306	-	-	-	-
1	41-A	0/306	-	-	-	-
1	42-A	0/306	-	-	-	-
1	43-A	0/306	-	-	-	-
1	44-A	0/306	-	-	-	-
1	45-A	0/306	-	-	-	-
1	46-A	0/306	-	-	-	-
1	47-A	0/306	-	-	-	-
1	48-A	0/306	-	-	-	-
1	49-A	0/306	-	-	-	-
1	50-A	0/306	-	-	-	-
1	51-A	0/306	-	-	-	-
1	52-A	0/306	-	-	-	-
1	53-A	0/306	-	-	-	-
1	54-A	0/306	-	-	-	-
All	All	306/16524 (1%)	3.36	240 (78%) 0 0	0, 0, 0, 0	306 (100%)

All (240) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	1-A	50	LEU	17.3
1	1-A	305	PHE	16.1
1	1-A	303	VAL	13.2
1	1-A	154	TYR	12.9
1	1-A	48	ASP	10.9
1	1-A	304	THR	10.5
1	1-A	51	ASN	9.9
1	1-A	294	PHE	8.8
1	1-A	46	SER	8.5
1	1-A	49	MET	7.9
1	1-A	235	MET	7.8
1	1-A	72	ASN	7.6
1	1-A	300	CYS	7.6
1	1-A	70	ALA	7.5
1	1-A	47	GLU	7.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	1-A	52	PRO	7.3
1	1-A	306	GLN	7.1
1	1-A	168	PRO	7.0
1	1-A	197	ASP	6.9
1	1-A	301	SER	6.9
1	1-A	119	ASN	6.8
1	1-A	194	ALA	6.7
1	1-A	217	ARG	6.7
1	1-A	3	PHE	6.6
1	1-A	73	VAL	6.4
1	1-A	256	GLN	6.3
1	1-A	82	MET	6.1
1	1-A	302	GLY	5.9
1	1-A	188	ARG	5.9
1	1-A	122	PRO	5.9
1	1-A	153	ASP	5.9
1	1-A	277	ASN	5.6
1	1-A	298	ARG	5.4
1	1-A	193	ALA	5.4
1	1-A	142	ASN	5.3
1	1-A	45	THR	5.2
1	1-A	71	GLY	5.2
1	1-A	191	ALA	5.2
1	1-A	282	LEU	5.1
1	1-A	165	MET	5.0
1	1-A	57	LEU	5.0
1	1-A	219	PHE	4.9
1	1-A	169	THR	4.9
1	1-A	110	GLN	4.8
1	1-A	155	ASP	4.8
1	1-A	24	THR	4.7
1	1-A	190	THR	4.7
1	1-A	259	ILE	4.7
1	1-A	107	GLN	4.7
1	1-A	134	PHE	4.7
1	1-A	178	GLU	4.6
1	1-A	156	CYS	4.5
1	1-A	189	GLN	4.5
1	1-A	220	LEU	4.5
1	1-A	218	TRP	4.5
1	1-A	278	GLY	4.5
1	1-A	167	LEU	4.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	1-A	26	THR	4.5
1	1-A	61	LYS	4.4
1	1-A	69	GLN	4.4
1	1-A	230	PHE	4.4
1	1-A	106	ILE	4.3
1	1-A	198	THR	4.3
1	1-A	56	ASP	4.3
1	1-A	207	TRP	4.3
1	1-A	1	SER	4.2
1	1-A	279	ARG	4.2
1	1-A	44	CYS	4.2
1	1-A	67	LEU	4.2
1	1-A	208	LEU	4.2
1	1-A	23	GLY	4.2
1	1-A	261	VAL	4.2
1	1-A	101	TYR	4.1
1	1-A	241	PRO	4.1
1	1-A	171	VAL	4.0
1	1-A	136	ILE	4.0
1	1-A	6	MET	4.0
1	1-A	75	LEU	4.0
1	1-A	232	LEU	4.0
1	1-A	66	PHE	3.9
1	1-A	43	ILE	3.9
1	1-A	104	VAL	3.9
1	1-A	243	THR	3.9
1	1-A	141	LEU	3.9
1	1-A	192	GLN	3.8
1	1-A	260	ALA	3.7
1	1-A	108	PRO	3.7
1	1-A	55	GLU	3.7
1	1-A	157	VAL	3.6
1	1-A	284	SER	3.6
1	1-A	272	LEU	3.6
1	1-A	150	PHE	3.6
1	1-A	249	ILE	3.6
1	1-A	286	LEU	3.5
1	1-A	196	THR	3.5
1	1-A	285	ALA	3.5
1	1-A	227	LEU	3.4
1	1-A	262	LEU	3.4
1	1-A	18	VAL	3.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	1-A	287	LEU	3.4
1	1-A	244	GLN	3.4
1	1-A	200	ILE	3.4
1	1-A	166	GLU	3.4
1	1-A	206	ALA	3.4
1	1-A	5	LYS	3.3
1	1-A	20	VAL	3.3
1	1-A	36	VAL	3.3
1	1-A	31	TRP	3.3
1	1-A	222	ARG	3.3
1	1-A	148	VAL	3.3
1	1-A	258	GLY	3.3
1	1-A	58	LEU	3.3
1	1-A	39	PRO	3.3
1	1-A	12	LYS	3.2
1	1-A	60	ARG	3.2
1	1-A	291	PHE	3.2
1	1-A	2	GLY	3.2
1	1-A	114	VAL	3.2
1	1-A	268	LEU	3.2
1	1-A	86	VAL	3.2
1	1-A	186	VAL	3.2
1	1-A	204	VAL	3.2
1	1-A	276	MET	3.1
1	1-A	42	VAL	3.1
1	1-A	173	ALA	3.1
1	1-A	126	TYR	3.1
1	1-A	257	THR	3.1
1	1-A	211	ALA	3.1
1	1-A	274	ASN	3.1
1	1-A	32	LEU	3.1
1	1-A	123	SER	3.1
1	1-A	195	GLY	3.1
1	1-A	78	ILE	3.1
1	1-A	288	GLU	3.0
1	1-A	91	VAL	3.0
1	1-A	296	VAL	3.0
1	1-A	149	GLY	3.0
1	1-A	202	VAL	3.0
1	1-A	209	TYR	3.0
1	1-A	212	VAL	3.0
1	1-A	41	HIS	3.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	1-A	53	ASN	3.0
1	1-A	214	ASN	3.0
1	1-A	271	LEU	3.0
1	1-A	83	GLN	3.0
1	1-A	216	ASP	3.0
1	1-A	182	TYR	2.9
1	1-A	13	VAL	2.9
1	1-A	253	LEU	2.9
1	1-A	21	THR	2.9
1	1-A	280	THR	2.9
1	1-A	238	ASN	2.9
1	1-A	213	ILE	2.9
1	1-A	81	SER	2.9
1	1-A	54	TYR	2.9
1	1-A	205	LEU	2.9
1	1-A	215	GLY	2.9
1	1-A	118	TYR	2.9
1	1-A	98	THR	2.9
1	1-A	236	LYS	2.9
1	1-A	223	PHE	2.8
1	1-A	226	THR	2.8
1	1-A	115	LEU	2.8
1	1-A	255	ALA	2.8
1	1-A	8	PHE	2.8
1	1-A	265	CYS	2.8
1	1-A	270	GLU	2.8
1	1-A	29	GLY	2.8
1	1-A	129	ALA	2.7
1	1-A	299	GLN	2.7
1	1-A	239	TYR	2.7
1	1-A	27	LEU	2.7
1	1-A	250	LEU	2.7
1	1-A	38	CYS	2.7
1	1-A	94	ALA	2.7
1	1-A	87	LEU	2.7
1	1-A	159	PHE	2.7
1	1-A	19	GLN	2.6
1	1-A	9	PRO	2.6
1	1-A	128	CYS	2.6
1	1-A	210	ALA	2.6
1	1-A	37	TYR	2.6
1	1-A	161	TYR	2.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	1-A	96	PRO	2.6
1	1-A	234	ALA	2.6
1	1-A	132	PRO	2.6
1	1-A	283	GLY	2.6
1	1-A	59	ILE	2.5
1	1-A	177	LEU	2.5
1	1-A	181	PHE	2.5
1	1-A	242	LEU	2.5
1	1-A	224	THR	2.5
1	1-A	85	CYS	2.5
1	1-A	266	ALA	2.5
1	1-A	237	TYR	2.5
1	1-A	140	PHE	2.5
1	1-A	185	PHE	2.5
1	1-A	292	THR	2.5
1	1-A	133	ASN	2.4
1	1-A	225	THR	2.4
1	1-A	100	LYS	2.4
1	1-A	4	ARG	2.4
1	1-A	281	ILE	2.4
1	1-A	22	CYS	2.3
1	1-A	117	CYS	2.3
1	1-A	233	VAL	2.3
1	1-A	201	THR	2.3
1	1-A	7	ALA	2.3
1	1-A	35	VAL	2.3
1	1-A	121	SER	2.3
1	1-A	199	THR	2.3
1	1-A	74	GLN	2.3
1	1-A	124	GLY	2.3
1	1-A	174	GLY	2.3
1	1-A	30	LEU	2.3
1	1-A	152	ILE	2.3
1	1-A	16	CYS	2.2
1	1-A	245	ASP	2.2
1	1-A	25	THR	2.2
1	1-A	246	HIS	2.2
1	1-A	62	SER	2.2
1	1-A	229	ASP	2.2
1	1-A	97	LYS	2.2
1	1-A	102	LYS	2.2
1	1-A	295	ASP	2.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	1-A	275	GLY	2.1
1	1-A	175	THR	2.1
1	1-A	183	GLY	2.1
1	1-A	139	SER	2.1
1	1-A	254	SER	2.1
1	1-A	77	VAL	2.1
1	1-A	247	VAL	2.1
1	1-A	34	ASP	2.1
1	1-A	240	GLU	2.1
1	1-A	95	ASN	2.1
1	1-A	251	GLY	2.1
1	1-A	263	ASP	2.1
1	1-A	68	VAL	2.0
1	1-A	15	GLY	2.0
1	1-A	137	LYS	2.0

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

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

5.3 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

5.4 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	DMS	1-A	404	4/4	0.44	0.50	17,17,18,18	10
2	DMS	2-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	3-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	4-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	5-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	6-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	7-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	8-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors($\text{\AA}^2$)	Q<0.9
2	DMS	9-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	10-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	11-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	12-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	13-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	14-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	15-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	16-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	17-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	18-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	19-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	20-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	21-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	22-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	23-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	24-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	25-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	26-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	27-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	28-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	29-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	30-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	31-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	32-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	33-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	34-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	35-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	36-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	37-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	38-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	39-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	40-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	41-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	42-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	43-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	44-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	45-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	46-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	47-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	48-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	49-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	50-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors($\text{\AA}^2$)	Q<0.9
2	DMS	51-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	52-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	53-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	54-A	401	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	1-A	403	4/4	0.51	0.45	16,17,17,17	10
2	DMS	2-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	3-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	4-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	5-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	6-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	7-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	8-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	9-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	10-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	11-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	12-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	13-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	14-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	15-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	16-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	17-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	18-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	19-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	20-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	21-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	22-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	23-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	24-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	25-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	26-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	27-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	28-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	29-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	30-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	31-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	32-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	33-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	34-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	35-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	36-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	37-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	38-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors($\text{\AA}^2$)	Q<0.9
2	DMS	39-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	40-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	41-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	42-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	43-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	44-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	45-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	46-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	47-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	48-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	49-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	50-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	51-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	52-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	53-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	54-A	402	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	1-A	402	4/4	0.69	0.38	17,17,18,18	10
2	DMS	2-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	3-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	4-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	5-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	6-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	7-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	8-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	9-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	10-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	11-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	12-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	13-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	14-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	15-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	16-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	17-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	18-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	19-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	20-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	21-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	22-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	23-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	24-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	25-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	26-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors($\text{\AA}^2$)	Q<0.9
2	DMS	27-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	28-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	29-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	30-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	31-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	32-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	33-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	34-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	35-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	36-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	37-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	38-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	39-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	40-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	41-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	42-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	43-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	44-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	45-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	46-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	47-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	48-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	49-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	50-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	51-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	52-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	53-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	54-A	403	4/4	-	-	16,17,17,17	10
2	DMS	1-A	405	4/4	0.73	0.30	17,17,17,17	10
2	DMS	2-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	3-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	4-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	5-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	6-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	7-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	8-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	9-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	10-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	11-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	12-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	13-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	14-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors($\text{\AA}^2$)	Q<0.9
2	DMS	15-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	16-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	17-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	18-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	19-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	20-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	21-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	22-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	23-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	24-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	25-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	26-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	27-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	28-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	29-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	30-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	31-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	32-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	33-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	34-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	35-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	36-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	37-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	38-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	39-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	40-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	41-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	42-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	43-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	44-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	45-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	46-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	47-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	48-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	49-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	50-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	51-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	52-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	53-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
2	DMS	54-A	404	4/4	-	-	17,17,18,18	10
3	ZN	1-A	406	1/1	0.87	0.61	17,17,17,17	1
2	DMS	2-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors($\text{\AA}^2$)	Q<0.9
2	DMS	3-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	4-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	5-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	6-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	7-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	8-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	9-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	10-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	11-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	12-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	13-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	14-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	15-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	16-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	17-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	18-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	19-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	20-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	21-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	22-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	23-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	24-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	25-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	26-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	27-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	28-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	29-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	30-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	31-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	32-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	33-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	34-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	35-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	36-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	37-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	38-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	39-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	40-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	41-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	42-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	43-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	44-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors($\text{\AA}^2$)	Q<0.9
2	DMS	45-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	46-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	47-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	48-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	49-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	50-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	51-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	52-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	53-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	54-A	405	4/4	-	-	17,17,17,17	10
2	DMS	1-A	401	4/4	0.92	0.12	17,17,17,17	10
3	ZN	2-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	3-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	4-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	5-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	6-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	7-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	8-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	9-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	10-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	11-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	12-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	13-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	14-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	15-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	16-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	17-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	18-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	19-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	20-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	21-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	22-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	23-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	24-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	25-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	26-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	27-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	28-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	29-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	30-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	31-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	32-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors($\text{\AA}^2$)	Q<0.9
3	ZN	33-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	34-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	35-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	36-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	37-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	38-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	39-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	40-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	41-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	42-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	43-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	44-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	45-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	46-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	47-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	48-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	49-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	50-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	51-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	52-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	53-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1
3	ZN	54-A	406	1/1	-	-	17,17,17,17	1

5.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.