



Full wwPDB EM Validation Report ⓘ

Jun 9, 2026 – 04:55 pm BST

PDB ID : 9TPJ / pdb_00009tpj
EMDB ID : EMD-56106
Title : Human Cardiac Interacting Heads Motif, E525K mutant
Authors : Lannes, L.; Kikuti, C.M.; Auguin, D.; Robert-Paganin, J.; Houdusse, A.
Deposited on : 2025-12-18
Resolution : 3.02 Å(reported)

This is a Full wwPDB EM 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/EMValidationReportHelp>

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:

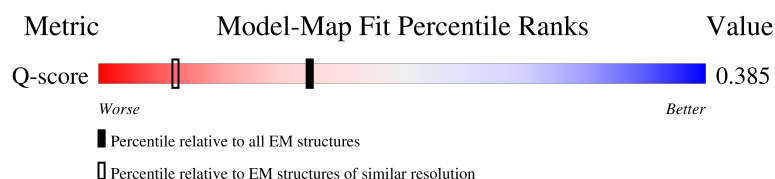
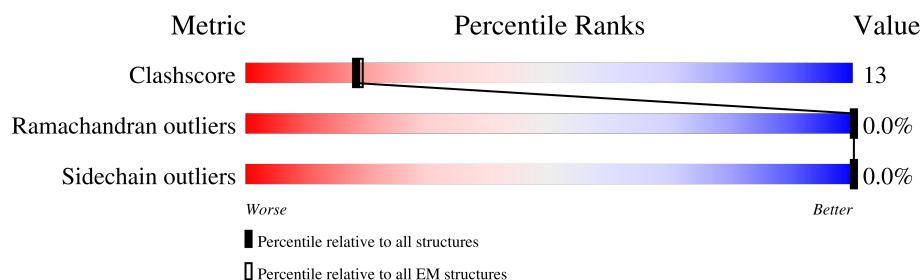
EMDB validation analysis : 0.0.1.dev132
Mogul : 1.8.4, CSD as541be (2020)
MolProbity : 4-5-2 with Phenix2.0
Buster-report : wwPDB partial adaption of 1.1.7 (2018)
Percentile statistics : 20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
EM percentile statistics : 202505.v01 (Using data in the EMDB archive up until May 2025)
MapQ : 1.9.13
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:
ELECTRON MICROSCOPY

The reported resolution of this entry is 3.02 Å.

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





Metric	Whole archive (#Entries)	EM structures (#Entries)	Similar EM resolution (#Entries, resolution range(Å))
Clashscore	229148	23984	-
Ramachandran outliers	224038	23583	-
Sidechain outliers	223484	23102	-
Q-score	-	25397	13913 (2.52 - 3.52)

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the map. The red, orange, yellow and green segments of the 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 EM map (all-atom inclusion $< 40\%$). The numeric value is given above the bar.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	1935	
1	B	1935	
2	C	195	
2	D	195	

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Length	Quality of chain
3	E	166	
3	F	166	

2 Entry composition [i](#)

There are 6 unique types of molecules in this entry. The entry contains 19337 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

In the tables below, the AltConf column contains the number of residues with at least one atom in alternate conformation and the Trace column contains the number of residues modelled with at most 2 atoms.

- Molecule 1 is a protein called Myosin-7.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
1	A	914	Total	C	N	O	S	0	0
			7384	4711	1267	1366	40		
1	B	881	Total	C	N	O	S	0	0
			7155	4572	1224	1319	40		

There are 2 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	525	LYS	GLU	engineered mutation	UNP P12883
B	525	LYS	GLU	engineered mutation	UNP P12883

- Molecule 2 is a protein called Myosin light chain 3.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
2	C	157	Total	C	N	O	S	0	0
			1248	783	209	245	11		
2	D	158	Total	C	N	O	S	0	0
			1256	787	210	248	11		

- Molecule 3 is a protein called Myosin regulatory light chain 2, ventricular/cardiac muscle isoform.

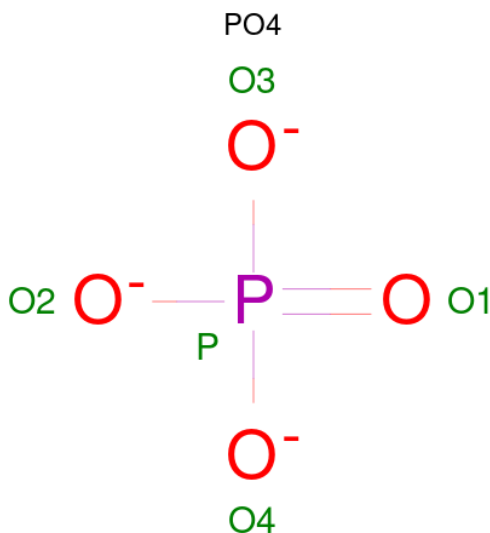
Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
3	E	137	Total	C	N	O	S	0	0
			1108	706	178	218	6		
3	F	139	Total	C	N	O	S	0	0
			1120	714	183	217	6		

- Molecule 4 is ADENOSINE-5'-DIPHOSPHATE (CCD ID: ADP) (formula: C₁₀H₁₅N₅O₁₀P₂) (labeled as "Ligand of Interest" by depositor).



Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf
4	A	1	Total 27	C 10	N 5	O 10	P 2	0
4	B	1	Total 27	C 10	N 5	O 10	P 2	0

- Molecule 5 is PHOSPHATE ION (CCD ID: PO4) (formula: O_4P).



Mol	Chain	Residues	Atoms			AltConf
5	A	1	Total 5	O 4	P 1	0
5	B	1	Total 5	O 4	P 1	0

- Molecule 6 is MAGNESIUM ION (CCD ID: MG) (formula: Mg).

Mol	Chain	Residues	Atoms		AltConf
6	A	1	Total 1	Mg 1	0
6	B	1	Total 1	Mg 1	0

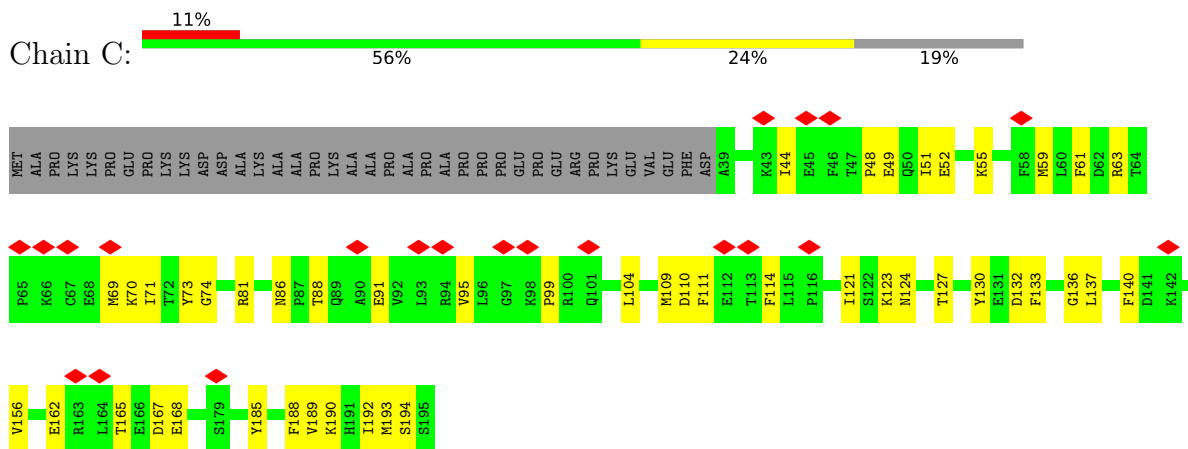




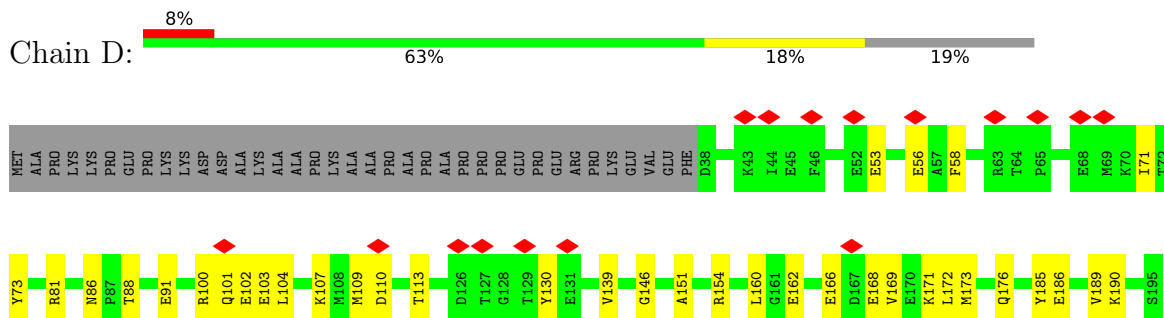
ARG	ASN	GLU	GLN	GLY	THR	TYR	LEU	VAL	THR	MET	THR	THR	THR	ALA	ARG	ASP	ASP	SER	S810	Y678	S819	Q880	Q881	Q882	Q883	Q884	Q885	Q886	Q887	Q888	Q889	Q890	Q891	Q892	Q893	Q894	Q895	Q896	Q897	Q898	Q899	Q900	Q901	Q902	Q903	Q904	Q905	Q906	Q907	Q908	Q909	Q910	Q911	Q912	Q913	Q914	Q915	Q916	Q917	Q918	Q919	Q920	Q921	Q922	Q923	Q924	Q925	Q926	Q927	Q928	Q929	Q930	Q931	Q932	Q933	Q934	Q935	Q936	Q937	Q938	Q939	Q940	Q941	Q942	Q943	Q944	Q945	Q946	Q947	Q948	Q949	Q950	Q951	Q952	Q953	Q954	Q955	Q956	Q957	Q958	Q959	Q960	Q961	Q962	Q963	Q964	Q965	Q966	Q967	Q968	Q969	Q970	Q971	Q972	Q973	Q974	Q975	Q976	Q977	Q978	Q979	Q980	Q981	Q982	Q983	Q984	Q985	Q986	Q987	Q988	Q989	Q990	Q991	Q992	Q993	Q994	Q995	Q996	Q997	Q998	Q999	Q1000	Q1001	Q1002	Q1003	Q1004	Q1005	Q1006	Q1007	Q1008	Q1009	Q1010	Q1011	Q1012	Q1013	Q1014	Q1015	Q1016	Q1017	Q1018	Q1019	Q1020	Q1021	Q1022	Q1023	Q1024	Q1025	Q1026	Q1027	Q1028	Q1029	Q1030	Q1031	Q1032	Q1033	Q1034	Q1035	Q1036	Q1037	Q1038	Q1039	Q1040	Q1041	Q1042	Q1043	Q1044	Q1045	Q1046	Q1047	Q1048	Q1049	Q1050	Q1051	Q1052	Q1053	Q1054	Q1055	Q1056	Q1057	Q1058	Q1059	Q1060	Q1061	Q1062	Q1063	Q1064	Q1065	Q1066	Q1067	Q1068	Q1069	Q1070	Q1071	Q1072	Q1073	Q1074	Q1075	Q1076	Q1077	Q1078	Q1079	Q1080	Q1081	Q1082	Q1083	Q1084	Q1085	Q1086	Q1087	Q1088	Q1089	Q1090	Q1091	Q1092	Q1093	Q1094	Q1095	Q1096	Q1097	Q1098	Q1099	Q1100	Q1101	Q1102	Q1103	Q1104	Q1105	Q1106	Q1107	Q1108	Q1109	Q1110	Q1111	Q1112	Q1113	Q1114	Q1115	Q1116	Q1117	Q1118	Q1119	Q1120	Q1121	Q1122	Q1123	Q1124	Q1125	Q1126	Q1127	Q1128	Q1129	Q1130	Q1131	Q1132	Q1133	Q1134	Q1135	Q1136	Q1137	Q1138	Q1139	Q1140	Q1141	Q1142	Q1143	Q1144	Q1145	Q1146	Q1147	Q1148	Q1149	Q1150	Q1151	Q1152	Q1153	Q1154	Q1155	Q1156	Q1157	Q1158	Q1159	Q1160	Q1161	Q1162	Q1163	Q1164	Q1165	Q1166	Q1167	Q1168	Q1169	Q1170	Q1171	Q1172	Q1173	Q1174	Q1175	Q1176	Q1177	Q1178	Q1179	Q1180	Q1181	Q1182	Q1183	Q1184	Q1185	Q1186	Q1187	Q1188	Q1189	Q1190	Q1191	Q1192	Q1193	Q1194	Q1195	Q1196	Q1197	Q1198	Q1199	Q1200	Q1201	Q1202	Q1203	Q1204	Q1205	Q1206	Q1207	Q1208	Q1209	Q1210	Q1211	Q1212	Q1213	Q1214	Q1215	Q1216	Q1217	Q1218	Q1219	Q1220	Q1221	Q1222	Q1223	Q1224	Q1225	Q1226	Q1227	Q1228	Q1229	Q1230	Q1231	Q1232	Q1233	Q1234	Q1235	Q1236	Q1237	Q1238	Q1239	Q1240	Q1241	Q1242	Q1243	Q1244	Q1245	Q1246	Q1247	Q1248	Q1249	Q1250	Q1251	Q1252	Q1253	Q1254	Q1255	Q1256	Q1257	Q1258	Q1259	Q1260	Q1261	Q1262	Q1263	Q1264	Q1265	Q1266	Q1267	Q1268	Q1269	Q1270	Q1271	Q1272	Q1273	Q1274	Q1275	Q1276	Q1277	Q1278	Q1279	Q1280	Q1281	Q1282	Q1283	Q1284	Q1285	Q1286	Q1287	Q1288	Q1289	Q1290	Q1291	Q1292	Q1293	Q1294	Q1295	Q1296	Q1297	Q1298	Q1299	Q1300	Q1301	Q1302	Q1303	Q1304	Q1305	Q1306	Q1307	Q1308	Q1309	Q1310	Q1311	Q1312	Q1313	Q1314	Q1315	Q1316	Q1317	Q1318	Q1319	Q1320	Q1321	Q1322	Q1323	Q1324	Q1325	Q1326	Q1327	Q1328	Q1329	Q1330	Q1331	Q1332	Q1333	Q1334	Q1335	Q1336	Q1337	Q1338	Q1339	Q1340	Q1341	Q1342	Q1343	Q1344	Q1345	Q1346	Q1347	Q1348	Q1349	Q1350	Q1351	Q1352	Q1353	Q1354	Q1355	Q1356	Q1357	Q1358	Q1359	Q1360	Q1361	Q1362	Q1363	Q1364	Q1365	Q1366	Q1367	Q1368	Q1369	Q1370	Q1371	Q1372	Q1373	Q1374	Q1375	Q1376	Q1377	Q1378	Q1379	Q1380	Q1381	Q1382	Q1383	Q1384	Q1385	Q1386	Q1387	Q1388	Q1389	Q1390	Q1391	Q1392	Q1393	Q1394	Q1395	Q1396	Q1397	Q1398	Q1399	Q1400	Q1401	Q1402	Q1403	Q1404	Q1405	Q1406	Q1407	Q1408	Q1409	Q1410	Q1411	Q1412	Q1413	Q1414	Q1415	Q1416	Q1417	Q1418	Q1419	Q1420	Q1421	Q1422	Q1423	Q1424	Q1425	Q1426	Q1427	Q1428	Q1429	Q1430	Q1431	Q1432	Q1433	Q1434	Q1435	Q1436	Q1437	Q1438	Q1439	Q1440	Q1441	Q1442	Q1443	Q1444	Q1445	Q1446	Q1447	Q1448	Q1449	Q1450	Q1451	Q1452	Q1453	Q1454	Q1455	Q1456	Q1457	Q1458	Q1459	Q1460	Q1461	Q1462	Q1463	Q1464	Q1465	Q1466	Q1467	Q1468	Q1469	Q1470	Q1471	Q1472	Q1473	Q1474	Q1475	Q1476	Q1477	Q1478	Q1479	Q1480	Q1481	Q1482	Q1483	Q1484	Q1485	Q1486	Q1487	Q1488	Q1489	Q1490	Q1491	Q1492	Q1493	Q1494	Q1495	Q1496	Q1497	Q1498	Q1499	Q1500	Q1501	Q1502	Q1503	Q1504	Q1505	Q1506	Q1507	Q1508	Q1509	Q1510	Q1511	Q1512	Q1513	Q1514	Q1515	Q1516	Q1517	Q1518	Q1519	Q1520	Q1521	Q1522	Q1523	Q1524	Q1525	Q1526	Q1527	Q1528	Q1529	Q1530	Q1531	Q1532	Q1533	Q1534	Q1535	Q1536	Q1537	Q1538	Q1539	Q1540	Q1541	Q1542	Q1543	Q1544	Q1545	Q1546	Q1547	Q1548	Q1549	Q1550	Q1551	Q1552	Q1553	Q1554	Q1555	Q1556	Q1557	Q1558	Q1559	Q1560	Q1561	Q1562	Q1563	Q1564	Q1565	Q1566	Q1567	Q1568	Q1569	Q1570	Q1571	Q1572	Q1573	Q1574	Q1575	Q1576	Q1577	Q1578	Q1579	Q1580	Q1581	Q1582	Q1583	Q1584	Q1585	Q1586	Q1587	Q1588	Q1589	Q1590	Q1591	Q1592	Q1593	Q1594	Q1595	Q1596	Q1597	Q1598	Q1599	Q1600	Q1601	Q1602	Q1603	Q1604	Q1605	Q1606	Q1607	Q1608	Q1609	Q1610	Q1611	Q1612	Q1613	Q1614	Q1615	Q1616	Q1617	Q1618	Q1619	Q1620	Q1621	Q1622	Q1623	Q1624	Q1625	Q1626	Q1627	Q1628	Q1629	Q1630	Q1631	Q1632	Q1633	Q1634	Q1635	Q1636	Q1637	Q1638	Q1639	Q1640	Q1641	Q1642	Q1643	Q1644	Q1645	Q1646	Q1647	Q1648	Q1649	Q1650	Q1651	Q1652	Q1653	Q1654	Q1655	Q1656	Q1657	Q1658	Q1659	Q1660	Q1661	Q1662	Q1663	Q1664	Q1665	Q1666	Q1667	Q1668	Q1669	Q1670	Q1671	Q1672	Q1673	Q1674	Q1675	Q1676	Q1677	Q1678	Q1679	Q1680	Q1681	Q1682	Q1683	Q1684	Q1685	Q1686	Q1687	Q1688	Q1689	Q1690	Q1691	Q1692	Q1693	Q1694	Q1695	Q1696	Q1697	Q1698	Q1699	Q1700	Q1701	Q1702	Q1703	Q1704	Q1705	Q1706	Q1707	Q1708	Q1709	Q1710	Q1711	Q1712	Q1713	Q1714	Q1715	Q1716	Q1717	Q1718	Q1719	Q1720	Q1721	Q1722	Q1723	Q1724	Q1725	Q1726	Q1727	Q1728	Q1729	Q1730	Q1731	Q1732	Q1733	Q1734	Q1735	Q1736	Q1737	Q1738	Q1739	Q1740	Q1741	Q1742	Q1743	Q1744	Q1745	Q1746	Q1747	Q1748	Q1749	Q1750	Q1751	Q1752	Q1753	Q1754	Q1755	Q1756	Q1757	Q1758	Q1759	Q1760	Q1761	Q1762	Q1763	Q1764	Q1765	Q1766	Q1767	Q1768	Q1769	Q1770	Q1771	Q1772	Q1773	Q1774	Q1775	Q1776	Q1777	Q1778	Q1779	Q1780	Q1781	Q1782	Q1783	Q1784	Q1785	Q1786	Q1787	Q1788	Q1789	Q1790	Q1791	Q1792	Q1793	Q1794	Q1795	Q1796	Q1797	Q1798	Q1799	Q1800	Q1801	Q1802	Q1803	Q1804	Q1805	Q1806	Q1807	Q1808	Q1809	Q1810	Q1811	Q1812	Q1813	Q1814	Q1815	Q1816	Q1817	Q1818	Q1819	Q1820	Q1821	Q1822	Q1823	Q1824	Q1825	Q1826	Q1827	Q1828	Q1829	Q1830	Q1831	Q1832	Q1833	Q1834	Q1835	Q1836	Q1837	Q1838	Q1839	Q1840	Q1841	Q1842	Q1843	Q1844	Q1845	Q1846	Q1847	Q1848	Q1849	Q1850	Q1851	Q1852	Q1853	Q1854	Q1855	Q1856	Q1857	Q1858	Q1859	Q1860	Q1861	Q1862	Q1863	Q1864	Q1865	Q1866	Q1867	Q1868	Q1869	Q1870	Q1871	Q1872	Q1873	Q1874	Q1875	Q1876	Q1877	Q1878	Q1879	Q1880	Q1881	Q1882	Q1883	Q1884	Q1885	Q1886	Q1887	Q1888	Q1889	Q1890	Q1891	Q1892	Q1893	Q1894	Q1895	Q1896	Q1897	Q1898	Q1899	Q1900	Q1901	Q1902	Q1903	Q1904	Q1905	Q1906	Q1907	Q1908	Q1909	Q1910	Q1911	Q1912	Q1913	Q1914	Q1915	Q1916	Q1917	Q1918	Q1919	Q1920	Q1921	Q1922	Q1923	Q1924	Q1925	Q1926	Q1927	Q1928	Q1929	Q1930	Q1931	Q1932	Q1933	Q1934	Q1935	Q1936	Q1937	Q1938	Q1939	Q1940	Q1941	Q1942	Q1943	Q1944	Q1945	Q1946	Q1947	Q1948	Q1949	Q1950	Q1951	Q1952	Q1953	Q1954	Q1955	Q1956	Q1957	Q1958	Q1959	Q1960	Q1961	Q1962	Q1963	Q1964	Q1965	Q1966	Q1967	Q1968	Q1969	Q1970	Q1971	Q1972	Q1973	Q1974	Q1975	Q1976	Q1977	Q1978	Q1979	Q1980	Q1981	Q1982	Q1983	Q1984	Q1985	Q1986	Q1987	Q1988	Q1989	Q1990	Q1991	Q1992	Q1993	Q1994	Q1995	Q1996	Q1997	Q1998	Q1999	Q2000	Q2001	Q2002	Q2003	Q2004	Q2005	Q2006	Q2007	Q2008	Q2009	Q2010	Q2011	Q2012	Q2013	Q2014	Q2015	Q2016	Q2017	Q2018	Q2019	Q2020	Q2021	Q2022	Q2023	Q2024	Q2025	Q2026	Q2027	Q2028	Q2029	Q2030	Q2031	Q2032	Q2033	Q2034	Q2035	Q2036	Q2037	Q2038	Q2039	Q2040	Q2041	Q2042	Q2043	Q2044	Q2045	Q2046	Q2047	Q2048	Q2049	Q2050	Q2051	Q2052	Q2053	Q2054	Q2055	Q2056	Q2057	Q2058	Q2059	Q2060	Q2061	Q2062	Q2063	Q2064	Q2065	Q2066	Q2067	Q2068	Q2069	Q2070	Q2071	Q2072	Q2073	Q2074	Q2075	Q2076	Q2077	Q2078	Q2079	Q2080	Q2081	Q2082	Q2083	Q2084	Q2085	Q2086	Q2087	Q2088	Q2089	Q2090	Q2091	Q2092	Q2093	Q2094	Q2095	Q2096	Q2097	Q2098	Q2099	Q2100	Q2101	Q
-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	---

[illegible]

- Molecule 2: Myosin light chain 3

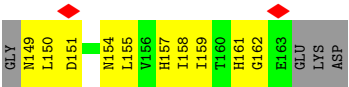


- Molecule 2: Myosin light chain 3

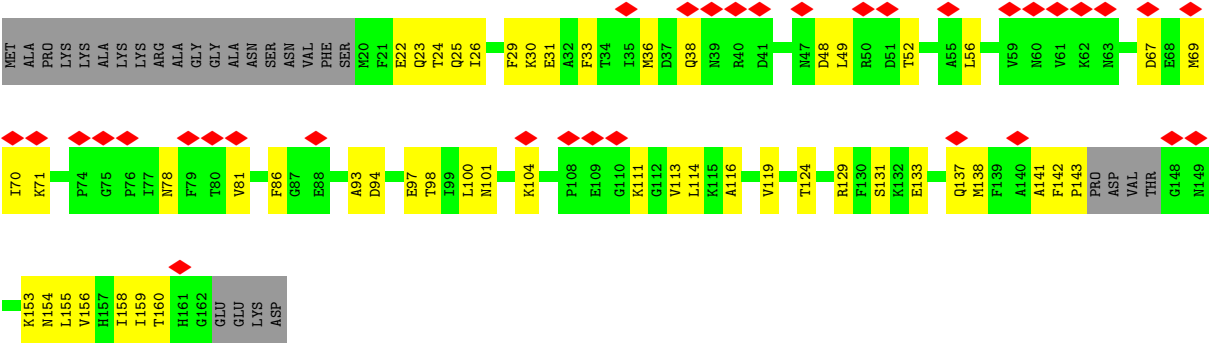


- Molecule 3: Myosin regulatory light chain 2, ventricular/cardiac muscle isoform





• Molecule 3: Myosin regulatory light chain 2, ventricular/cardiac muscle isoform



4 Experimental information

Property	Value	Source
EM reconstruction method	SINGLE PARTICLE	Depositor
Imposed symmetry	POINT, Not provided	
Number of particles used	680000	Depositor
Resolution determination method	FSC 0.143 CUT-OFF	Depositor
CTF correction method	PHASE FLIPPING AND AMPLITUDE CORRECTION	Depositor
Microscope	TFS KRIOS	Depositor
Voltage (kV)	300	Depositor
Electron dose ($e^-/\text{\AA}^2$)	50	Depositor
Minimum defocus (nm)	800	Depositor
Maximum defocus (nm)	2000	Depositor
Magnification	Not provided	
Image detector	GATAN K3 (6k x 4k)	Depositor
Maximum map value	2.356	Depositor
Minimum map value	-1.352	Depositor
Average map value	-0.000	Depositor
Map value standard deviation	0.031	Depositor
Recommended contour level	0.126	Depositor
Map size (Å)	352.38, 352.38, 352.38	wwPDB
Map dimensions	300, 300, 300	wwPDB
Map angles (°)	90.0, 90.0, 90.0	wwPDB
Pixel spacing (Å)	1.1746, 1.1746, 1.1746	Depositor

5 Model quality

5.1 Standard geometry

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: ADP, M3L, PO4, MG

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	0.18	0/7505	0.39	0/10097
1	B	0.16	0/7271	0.38	0/9783
2	C	0.12	0/1267	0.37	0/1699
2	D	0.11	0/1275	0.33	0/1710
3	E	0.12	0/1128	0.36	0/1515
3	F	0.11	0/1140	0.32	0/1531
All	All	0.16	0/19586	0.38	0/26335

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

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	7384	0	7431	201	0
1	B	7155	0	7198	210	0
2	C	1248	0	1231	37	0
2	D	1256	0	1235	25	0
3	E	1108	0	1067	48	0
3	F	1120	0	1089	36	0
4	A	27	0	12	3	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
4	B	27	0	12	2	0
5	A	5	0	0	0	0
5	B	5	0	0	0	0
6	A	1	0	0	0	0
6	B	1	0	0	0	0
All	All	19337	0	19275	509	0

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 13.

All (509) 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:B:904:ARG:NH1	1:B:905:CYS:SG	2.55	0.80
3:F:137:GLN:HE21	3:F:138:MET:HE3	1.45	0.79
1:A:227:LEU:HD23	1:A:439:MET:HE3	1.66	0.78
1:A:276:GLN:NE2	1:A:282:ASP:OD2	2.20	0.75
1:A:269:GLU:O	1:A:283:TYR:OH	2.04	0.74
1:B:755:GLN:HB2	1:B:769:LEU:HD22	1.68	0.74
1:A:355:ALA:O	1:A:359:PHE:HB2	1.87	0.73
1:A:589:ASN:O	1:A:593:TRP:NE1	2.20	0.73
1:A:792:SER:HB2	2:D:172:LEU:HD11	1.70	0.73
1:B:277:LEU:HB2	1:B:280:GLU:HG3	1.70	0.73
1:A:798:ARG:NH2	2:D:86:ASN:OD1	2.22	0.72
1:A:874:GLU:OE1	1:B:869:ARG:NH2	2.23	0.72
1:A:172:GLN:HG2	1:A:666:HIS:HB3	1.72	0.72
1:A:845:ARG:HA	1:A:849:MET:HE2	1.72	0.71
1:A:277:LEU:HD13	1:A:470:PHE:HE1	1.56	0.70
1:A:863:LEU:O	1:A:867:GLU:HG2	1.91	0.70
2:C:189:VAL:HA	2:C:192:ILE:HG12	1.73	0.70
1:A:870:ARG:NH1	1:A:874:GLU:OE1	2.24	0.70
1:A:184:LYS:N	4:A:2001:ADP:O1B	2.25	0.69
1:A:721:ARG:O	1:A:777:ARG:NH1	2.26	0.69
3:E:39:ASN:ND2	3:E:43:PHE:O	2.27	0.68
1:B:238:ASN:ND2	4:B:2001:ADP:O2A	2.27	0.68
1:A:370:GLU:HG3	1:A:372:GLN:HB3	1.74	0.67
1:B:372:GLN:NE2	1:B:373:ALA:O	2.27	0.67
1:A:845:ARG:NH2	1:B:849:MET:SD	2.69	0.66
2:D:166:GLU:HA	2:D:169:VAL:HG12	1.77	0.66
1:A:403:ARG:NH2	1:B:454:GLN:O	2.28	0.66
1:B:91:ALA:O	1:B:706:ARG:NH1	2.29	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:90:MET:HE2	1:A:118:SER:HB3	1.76	0.65
1:B:838:PRO:HA	1:B:847:LYS:HZ2	1.60	0.65
1:B:126:ASN:ND2	1:B:181:GLY:O	2.30	0.65
1:B:836:ILE:HA	1:B:840:LEU:HB2	1.78	0.65
1:A:538:CYS:SG	1:A:597:ASN:ND2	2.67	0.65
1:B:486:GLN:OE1	1:B:671:ARG:NH2	2.30	0.65
1:B:793:ARG:HB3	2:C:81:ARG:HD3	1.77	0.64
1:B:845:ARG:NH2	3:E:28:GLU:O	2.31	0.64
1:A:725:LEU:HB3	1:A:749:LEU:HD11	1.80	0.64
1:A:714:LEU:HA	1:A:762:LYS:HD2	1.79	0.63
1:B:827:TRP:HE3	1:B:830:MET:HE1	1.62	0.63
1:B:548:PHE:O	1:B:552:LEU:N	2.31	0.63
1:A:126:ASN:ND2	1:A:181:GLY:O	2.32	0.63
1:A:177:THR:OG1	1:A:671:ARG:NH1	2.31	0.63
1:A:97:HIS:HD2	1:A:99:PRO:HD2	1.64	0.63
1:B:134:TYR:OH	4:B:2001:ADP:N6	2.25	0.63
2:C:189:VAL:HG22	2:C:193:MET:HE3	1.81	0.63
1:B:491:HIS:HA	1:B:495:VAL:HB	1.80	0.63
1:A:597:ASN:HA	1:A:647:VAL:HG22	1.82	0.62
1:A:904:ARG:O	1:A:908:LEU:HG	1.99	0.62
1:B:390:LEU:HD21	1:B:608:LEU:HB3	1.82	0.62
1:A:908:LEU:HB3	1:A:912:LYS:NZ	2.14	0.62
3:F:111:LYS:O	3:F:153:LYS:NZ	2.33	0.62
1:A:470:PHE:HB3	1:A:573:PRO:HB2	1.82	0.62
1:A:794:GLY:HA2	2:D:81:ARG:HB3	1.82	0.62
1:B:272:ARG:NH1	1:B:280:GLU:OE1	2.32	0.62
1:B:269:GLU:O	1:B:283:TYR:OH	2.17	0.61
1:A:724:ILE:HD11	2:D:139:VAL:HG21	1.81	0.61
2:C:137:LEU:HD13	2:C:185:TYR:HB2	1.82	0.61
1:A:102:LEU:HD21	1:A:686:ASN:HD22	1.66	0.61
1:A:90:MET:HA	1:A:93:LEU:HD13	1.82	0.61
1:A:224:ASN:O	1:A:228:GLU:HG2	2.01	0.61
1:A:265:THR:HG21	1:A:436:PHE:HE2	1.63	0.61
1:B:498:GLN:O	1:B:502:LYS:NZ	2.33	0.61
3:E:119:VAL:HG12	3:E:122:MET:HE2	1.81	0.61
1:B:893:ALA:O	1:B:897:ASN:ND2	2.34	0.61
1:A:72:LYS:HG3	1:A:73:GLU:HG2	1.83	0.61
1:A:161:ALA:O	1:A:172:GLN:NE2	2.30	0.61
1:B:522:ASP:O	1:B:526:LYS:HG2	2.01	0.61
1:B:784:ILE:HG21	2:C:136:GLY:HA3	1.83	0.61
1:B:829:TRP:HH2	3:E:73:ALA:HA	1.66	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:B:175:LEU:HD23	1:B:485:LEU:HD11	1.83	0.60
1:A:114:ILE:HD13	1:A:127:PRO:HG3	1.83	0.60
1:A:293:LYS:HG3	1:A:330:MET:HE2	1.83	0.60
1:A:58:LYS:HA	1:A:72:LYS:HD3	1.83	0.60
2:C:73:TYR:HD1	2:C:109:MET:HG2	1.66	0.60
1:A:269:GLU:HG3	1:A:474:GLU:HG2	1.84	0.60
3:E:144:PRO:O	3:E:149:ASN:N	2.34	0.60
1:B:58:LYS:HG2	1:B:72:LYS:HA	1.83	0.60
1:B:828:PRO:HA	1:B:831:LYS:HD3	1.84	0.60
1:B:567:ARG:HH22	1:B:585:ILE:HG23	1.65	0.60
1:A:895:GLN:HE22	1:B:890:GLN:HE22	1.49	0.60
1:A:179:GLU:O	1:A:184:LYS:NZ	2.35	0.59
1:A:471:ASN:O	1:A:589:ASN:N	2.33	0.59
1:A:879:SER:O	1:A:882:GLN:HG3	2.03	0.59
1:B:171:ASN:HB2	1:B:665:THR:HG22	1.82	0.59
3:F:156:VAL:HA	3:F:159:ILE:HG22	1.85	0.59
1:A:118:SER:HB2	1:A:702:ILE:HG21	1.84	0.59
1:A:463:ALA:HB3	1:A:478:ILE:HD12	1.85	0.59
1:B:98:GLU:HG3	1:B:699:LEU:HD22	1.85	0.58
1:A:234:LYS:HG2	1:A:239:ASP:HA	1.84	0.58
1:A:229:ALA:HA	1:A:284:HIS:HB2	1.85	0.58
1:A:711:ASN:HB3	1:A:770:LEU:HD13	1.86	0.58
1:B:814:ILE:O	1:B:818:ILE:HD12	2.02	0.58
3:F:114:LEU:HD23	3:F:119:VAL:HG11	1.84	0.58
3:E:115:LYS:HA	3:E:149:ASN:HA	1.85	0.58
1:A:760:HIS:O	1:A:761:THR:OG1	2.16	0.58
1:B:449:THR:HG21	1:B:451:GLN:HE21	1.69	0.58
1:B:486:GLN:NE2	1:B:696:ASN:O	2.37	0.58
1:A:166:LEU:HD13	2:D:151:ALA:HB1	1.86	0.58
1:B:761:THR:HG23	1:B:762:LYS:HG3	1.86	0.58
1:A:272:ARG:O	1:A:276:GLN:NE2	2.37	0.57
1:B:905:CYS:O	1:B:909:ILE:HD12	2.02	0.57
1:A:365:LYS:NZ	1:A:374:GLU:OE1	2.37	0.57
2:D:53:GLU:HA	2:D:56:GLU:HG3	1.86	0.57
1:A:881:LEU:O	1:A:885:ASN:HB2	2.03	0.57
1:A:449:THR:O	1:A:453:ARG:NH1	2.36	0.57
1:A:630:PRO:HB3	1:A:640:LYS:HB2	1.86	0.57
1:A:911:ASN:OD1	1:A:912:LYS:HD3	2.05	0.57
2:C:130:TYR:HA	2:C:193:MET:HE1	1.87	0.57
1:B:391:ASN:ND2	1:B:394:ASP:OD2	2.38	0.56
3:E:120:ARG:HE	3:E:138:MET:HE2	1.70	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:737:ASP:HB3	1:A:740:LYS:HB3	1.88	0.56
1:A:881:LEU:HD22	1:B:880:LEU:HD13	1.87	0.56
1:B:46:PHE:CG	1:B:99:PRO:HG3	2.40	0.56
3:F:23:GLN:O	3:F:26:ILE:N	2.38	0.56
1:A:125:VAL:HG12	1:A:675:PRO:HG3	1.87	0.56
1:A:720:GLN:NE2	2:D:139:VAL:O	2.39	0.56
1:A:765:PHE:HD2	1:A:770:LEU:HB2	1.70	0.56
1:B:597:ASN:OD1	1:B:646:THR:OG1	2.22	0.56
2:C:48:PRO:HA	2:C:51:ILE:HD13	1.87	0.56
2:C:74:GLY:HA2	2:C:104:LEU:HB2	1.88	0.56
1:A:243:ARG:HH12	1:A:466:GLU:CD	2.13	0.56
2:D:103:GLU:O	2:D:107:LYS:NZ	2.33	0.56
1:A:186:VAL:O	1:A:190:ARG:HG2	2.04	0.56
3:E:120:ARG:NH2	3:E:142:PHE:O	2.38	0.56
1:A:724:ILE:HG22	1:A:780:ARG:HB3	1.87	0.56
1:B:698:VAL:O	1:B:702:ILE:HD12	2.06	0.56
2:C:44:ILE:HG21	2:C:123:LYS:HE3	1.87	0.56
1:A:109:TYR:OH	1:A:126:ASN:O	2.15	0.56
1:B:356:ILE:HG23	1:B:428:ALA:HB1	1.88	0.56
3:E:138:MET:HE3	3:E:138:MET:O	2.06	0.56
1:B:755:GLN:HB3	1:B:766:LYS:HB2	1.88	0.56
1:B:787:ARG:HH11	2:C:127:THR:HA	1.71	0.55
1:B:853:LYS:HA	1:B:856:PHE:HD2	1.72	0.55
1:B:901:ALA:O	1:B:904:ARG:HD3	2.07	0.55
1:A:454:GLN:HG3	1:A:455:TYR:CD2	2.42	0.55
1:A:802:LYS:HA	1:A:805:LEU:HD12	1.89	0.54
1:A:318:THR:HG23	1:A:319:THR:HG23	1.88	0.54
1:B:875:GLU:HA	1:B:878:VAL:HG22	1.89	0.54
1:A:154:ILE:HA	1:A:157:ILE:HD12	1.90	0.54
1:A:277:LEU:HD23	1:A:277:LEU:H	1.72	0.54
1:A:467:ILE:HG12	1:A:586:VAL:HG12	1.90	0.54
3:F:26:ILE:O	3:F:30:LYS:HG2	2.07	0.54
1:B:816:TRP:CZ2	3:E:92:GLY:HA2	2.43	0.54
1:B:810:SER:O	1:B:814:ILE:HD12	2.08	0.53
1:B:868:ALA:O	1:B:871:LYS:HG3	2.08	0.53
1:B:676:ASN:ND2	1:B:683:VAL:O	2.41	0.53
1:B:913:ILE:O	1:B:916:GLU:HG3	2.08	0.53
1:A:181:GLY:N	4:A:2001:ADP:O3B	2.37	0.53
1:A:190:ARG:NH1	1:A:193:GLN:OE1	2.42	0.53
1:A:355:ALA:O	1:A:359:PHE:CB	2.57	0.53
1:B:279:ALA:HA	1:B:317:GLU:OE2	2.08	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:B:517:LEU:HD23	1:B:517:LEU:O	2.08	0.53
1:B:886:ASP:O	1:B:890:GLN:HG2	2.08	0.53
1:A:97:HIS:CD2	1:A:99:PRO:HD2	2.44	0.53
1:A:372:GLN:NE2	1:A:373:ALA:O	2.30	0.53
1:A:866:SER:O	1:A:870:ARG:HB2	2.08	0.53
1:B:544:THR:HB	1:B:547:THR:HG23	1.91	0.53
1:A:134:TYR:OH	4:A:2001:ADP:N6	2.39	0.53
2:C:190:LYS:O	2:C:194:SER:OG	2.25	0.53
1:A:228:GLU:HA	1:A:232:ASN:HD22	1.74	0.52
1:B:870:ARG:NH2	1:B:873:LEU:HD23	2.24	0.52
2:C:109:MET:HE1	2:C:114:PHE:HB2	1.90	0.52
3:F:33:PHE:HA	3:F:36:MET:HG3	1.91	0.52
1:B:872:GLU:O	1:B:875:GLU:HG3	2.09	0.52
3:F:131:SER:OG	3:F:133:GLU:OE1	2.26	0.52
3:F:23:GLN:O	3:F:26:ILE:HG22	2.09	0.52
3:F:116:ALA:HA	3:F:119:VAL:HG22	1.91	0.52
1:A:382:ASP:OD1	1:A:383:LYS:N	2.43	0.52
1:B:719:ARG:NH2	1:B:738:SER:O	2.43	0.52
1:B:129:M3L:HB3	1:B:681:PRO:HB3	1.91	0.52
1:B:328:GLU:O	1:B:332:THR:HG23	2.09	0.52
1:A:60:THR:HG22	1:A:70:THR:HB	1.90	0.52
1:B:80:ASN:OD1	1:B:94:THR:OG1	2.25	0.52
1:A:224:ASN:OD1	1:A:246:LYS:NZ	2.34	0.52
1:B:225:PRO:HA	1:B:228:GLU:HB2	1.91	0.52
1:B:814:ILE:HG12	3:E:103:PHE:HE1	1.75	0.52
1:B:827:TRP:CD1	1:B:828:PRO:HD2	2.45	0.52
1:A:295:PRO:HA	1:A:298:LEU:HB2	1.92	0.52
1:B:301:LEU:HA	1:B:387:LEU:HD21	1.92	0.52
1:B:522:ASP:HB3	1:B:526:LYS:HD3	1.91	0.52
1:B:858:ARG:HH12	1:B:862:ALA:HB2	1.73	0.52
1:B:659:MET:HA	1:B:662:LEU:HB2	1.91	0.52
2:C:167:ASP:OD1	2:C:168:GLU:N	2.43	0.52
1:A:277:LEU:HD13	1:A:470:PHE:CE1	2.41	0.51
1:A:365:LYS:O	1:A:374:GLU:N	2.34	0.51
1:B:532:SER:O	1:B:535:GLU:HG3	2.09	0.51
1:A:325:ASP:HA	1:A:328:GLU:HB2	1.92	0.51
1:A:870:ARG:HD2	1:B:869:ARG:CZ	2.41	0.51
3:E:21:PHE:CE2	3:E:84:THR:HA	2.44	0.51
3:E:119:VAL:HA	3:E:122:MET:HG2	1.92	0.51
3:E:121:GLU:OE1	3:E:132:LYS:NZ	2.43	0.51
1:A:111:SER:HB3	1:A:113:MET:HE3	1.91	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:B:416:ASN:OD1	1:B:417:VAL:N	2.39	0.51
1:A:714:LEU:O	1:A:718:PHE:N	2.40	0.51
3:F:38:GLN:HE22	3:F:48:ASP:HA	1.76	0.51
1:A:726:ASN:HB3	1:A:729:ALA:HB3	1.92	0.51
1:B:297:LEU:O	1:B:301:LEU:HB2	2.11	0.51
1:B:862:ALA:O	1:B:865:LYS:HG3	2.10	0.51
3:E:47:ASN:HA	3:E:50:ARG:HE	1.74	0.51
3:F:78:ASN:H	3:F:81:VAL:HG22	1.75	0.51
1:A:796:LEU:HD13	2:D:168:GLU:OE1	2.11	0.51
1:B:518:GLN:HA	1:B:521:ILE:HG22	1.93	0.51
1:A:908:LEU:HB3	1:A:912:LYS:HZ3	1.74	0.51
2:C:111:PHE:HA	2:C:114:PHE:HB3	1.92	0.51
1:A:709:PHE:O	1:A:712:ARG:NH2	2.45	0.50
1:A:781:LEU:HD11	2:D:160:LEU:HD23	1.94	0.50
1:B:891:VAL:HG12	1:B:895:GLN:HE22	1.75	0.50
1:A:502:LYS:HZ2	1:A:508:TRP:CD1	2.29	0.50
1:B:365:LYS:NZ	1:B:375:PRO:O	2.45	0.50
1:A:29:ARG:NH2	1:A:85:ASP:OD2	2.42	0.50
1:A:497:GLU:OE1	1:A:712:ARG:NH2	2.45	0.50
2:D:110:ASP:O	2:D:113:THR:HG22	2.12	0.50
2:D:146:GLY:HA2	2:D:185:TYR:HE1	1.76	0.50
1:A:535:GLU:OE2	1:A:652:ARG:NH1	2.41	0.50
1:B:121:PHE:CZ	1:B:698:VAL:HG23	2.47	0.50
1:B:130:TRP:HZ3	1:B:190:ARG:HH12	1.58	0.50
1:B:484:LYS:HG2	1:B:521:ILE:HD11	1.92	0.50
1:B:789:GLN:OE1	2:C:162:GLU:N	2.37	0.50
1:A:734:GLN:HB3	1:A:740:LYS:HE3	1.94	0.50
1:A:884:LYS:HE3	1:B:880:LEU:CD1	2.42	0.50
1:B:835:LYS:HE3	1:B:839:LEU:HD23	1.93	0.50
2:C:91:GLU:O	2:C:95:VAL:HG22	2.12	0.50
2:D:58:PHE:CZ	2:D:71:ILE:HG12	2.46	0.50
3:E:24:THR:HA	3:E:27:GLN:HE22	1.76	0.50
3:E:37:ASP:HB3	3:E:40:ARG:HH21	1.77	0.49
1:A:168:ASP:C	1:A:169:ARG:HD3	2.37	0.49
2:C:55:LYS:NZ	2:C:69:MET:SD	2.77	0.49
1:A:302:LEU:HD13	1:A:383:LYS:HG2	1.95	0.49
1:A:390:LEU:HD11	1:A:609:TYR:HE1	1.78	0.49
1:B:483:GLU:OE2	1:B:582:TYR:N	2.28	0.49
3:E:21:PHE:HD2	3:E:22:GLU:CD	2.20	0.49
2:C:55:LYS:HG3	2:C:59:MET:HE3	1.95	0.49
1:A:821:PHE:CZ	3:F:158:ILE:HD12	2.48	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:B:157:ILE:HD11	1:B:668:HIS:HB3	1.95	0.49
1:A:278:LYS:O	1:A:317:GLU:HG3	2.12	0.49
1:B:882:GLN:O	1:B:886:ASP:HB2	2.13	0.49
3:F:124:THR:OG1	3:F:129:ARG:NH2	2.45	0.49
1:A:513:PHE:HE2	1:A:704:ILE:HD13	1.77	0.49
1:A:908:LEU:HA	1:A:911:ASN:ND2	2.28	0.49
1:A:922:MET:HA	1:A:925:ARG:CD	2.43	0.49
1:B:461:ASP:N	1:B:461:ASP:OD1	2.45	0.49
2:C:165:THR:OG1	2:C:168:GLU:OE1	2.31	0.48
1:B:821:PHE:CD2	3:E:159:ILE:HG22	2.48	0.48
1:B:845:ARG:O	1:B:849:MET:HG2	2.13	0.48
1:B:876:LYS:HA	1:B:876:LYS:HD3	1.65	0.48
3:E:136:ASP:OD1	3:E:137:GLN:N	2.46	0.48
1:A:32:ASP:C	1:A:34:LYS:H	2.20	0.48
1:A:815:GLN:HA	1:A:818:ILE:HG12	1.95	0.48
2:C:49:GLU:HA	2:C:52:GLU:CD	2.39	0.48
1:A:96:LEU:HD11	1:A:702:ILE:HD11	1.95	0.48
1:A:224:ASN:HB2	1:A:225:PRO:HD3	1.96	0.48
1:A:856:PHE:CE1	1:B:859:LEU:HD22	2.49	0.48
1:B:37:VAL:HG12	1:B:78:GLN:HA	1.95	0.48
2:D:101:GLN:NE2	2:D:102:GLU:HG2	2.29	0.48
3:F:100:LEU:HD21	3:F:156:VAL:HG11	1.96	0.48
1:B:597:ASN:HD21	1:B:648:SER:HB3	1.79	0.48
2:C:140:PHE:CE1	2:C:156:VAL:HG21	2.48	0.48
1:A:228:GLU:O	1:A:232:ASN:HB2	2.14	0.48
1:B:646:THR:HG23	1:B:649:ALA:H	1.78	0.48
2:C:61:PHE:O	2:C:63:ARG:NH1	2.47	0.48
3:E:115:LYS:HG3	3:E:117:ASP:H	1.79	0.48
1:A:870:ARG:HA	1:A:873:LEU:HG	1.96	0.48
1:A:73:GLU:H	1:A:75:GLN:HE22	1.62	0.47
1:A:165:MET:HB2	1:A:172:GLN:NE2	2.29	0.47
1:B:23:ARG:O	1:B:27:GLN:HG2	2.14	0.47
1:B:553:PHE:O	1:B:557:LEU:HG	2.13	0.47
1:B:814:ILE:HG12	3:E:103:PHE:CE1	2.49	0.47
1:A:472:SER:H	1:A:475:GLN:HG3	1.79	0.47
1:B:788:ILE:HD11	2:C:133:PHE:HB3	1.94	0.47
1:B:849:MET:HA	1:B:852:MET:HE2	1.96	0.47
1:B:739:ARG:NH2	1:B:743:GLU:OE2	2.43	0.47
2:D:73:TYR:CD1	2:D:109:MET:HB2	2.49	0.47
1:A:910:LYS:HA	1:A:913:ILE:HG12	1.96	0.47
1:B:139:VAL:HG13	1:B:194:TYR:CD2	2.50	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:F:98:THR:HA	3:F:101:ASN:HD21	1.80	0.47
1:A:840:LEU:O	1:A:844:GLU:HB2	2.15	0.47
1:A:911:ASN:OD1	1:A:912:LYS:N	2.48	0.47
1:B:179:GLU:HG2	1:B:465:PHE:HB3	1.97	0.47
1:B:569:ILE:HB	1:B:572:LYS:HB2	1.95	0.47
1:B:614:LEU:HD23	1:B:616:LEU:H	1.79	0.47
1:B:692:GLN:HA	1:B:695:CYS:SG	2.55	0.47
1:B:765:PHE:HD2	1:B:769:LEU:HD23	1.79	0.47
2:C:165:THR:OG1	2:C:167:ASP:OD1	2.24	0.47
1:B:3:ASP:N	1:B:20:GLU:OE2	2.47	0.47
1:B:417:VAL:HA	1:B:420:VAL:HG12	1.97	0.47
1:B:869:ARG:HA	1:B:872:GLU:HB3	1.97	0.47
1:B:915:LEU:O	1:B:918:LYS:HB3	2.15	0.47
1:A:96:LEU:HD21	1:A:702:ILE:HG13	1.97	0.47
1:A:836:ILE:HG13	3:F:56:LEU:HD11	1.96	0.47
1:A:845:ARG:HD2	1:A:849:MET:HE3	1.95	0.47
3:E:28:GLU:CD	3:E:28:GLU:H	2.23	0.47
1:B:261:ALA:HB3	1:B:447:LEU:HD13	1.97	0.46
1:A:528:MET:HG3	1:B:910:LYS:HE3	1.98	0.46
1:A:888:GLN:HA	1:A:891:VAL:HG22	1.96	0.46
3:E:24:THR:O	3:E:26:ILE:HD12	2.15	0.46
1:A:873:LEU:HD12	1:A:874:GLU:N	2.29	0.46
1:B:243:ARG:NH2	1:B:466:GLU:OE2	2.34	0.46
1:B:567:ARG:NH2	1:B:585:ILE:HG23	2.29	0.46
1:A:899:ALA:O	1:A:902:GLU:N	2.48	0.46
1:B:63:THR:HG22	1:B:65:TYR:H	1.81	0.46
1:A:552:LEU:HD13	1:A:563:PHE:HZ	1.81	0.46
1:A:32:ASP:HB3	1:A:34:LYS:O	2.16	0.46
1:A:657:LYS:HG3	1:B:896:ASP:OD2	2.15	0.46
1:B:119:GLY:H	1:B:702:ILE:HG13	1.81	0.46
3:F:100:LEU:O	3:F:104:LYS:HG2	2.15	0.46
1:B:84:PHE:CE2	1:B:94:THR:HG23	2.51	0.45
1:B:836:ILE:HD11	3:E:52:THR:HG22	1.98	0.45
1:A:342:THR:OG1	1:A:345:GLU:OE1	2.28	0.45
1:A:870:ARG:HG3	1:B:869:ARG:NH1	2.31	0.45
1:A:881:LEU:HD13	1:B:880:LEU:HD13	1.98	0.45
3:F:156:VAL:O	3:F:160:THR:N	2.42	0.45
1:B:104:ASN:O	1:B:108:ARG:HG2	2.16	0.45
1:B:352:LEU:O	1:B:356:ILE:HG12	2.16	0.45
1:B:544:THR:O	1:B:547:THR:OG1	2.24	0.45
2:D:168:GLU:HA	2:D:171:LYS:HG2	1.98	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:E:155:LEU:O	3:E:159:ILE:HG23	2.16	0.45
3:E:158:ILE:C	3:E:161:HIS:H	2.24	0.45
3:F:25:GLN:HG3	3:F:29:PHE:CE2	2.52	0.45
1:B:301:LEU:HB3	1:B:303:ILE:HG12	1.98	0.45
1:B:845:ARG:NH1	3:E:28:GLU:HB3	2.31	0.45
1:B:31:PHE:CD2	1:B:82:PRO:HG3	2.51	0.45
1:B:582:TYR:O	1:B:695:CYS:HB2	2.17	0.45
1:B:662:LEU:O	1:B:665:THR:OG1	2.30	0.45
1:B:800:GLU:OE1	1:B:800:GLU:N	2.50	0.45
1:B:317:GLU:C	1:B:319:THR:H	2.24	0.45
1:B:339:LEU:CD2	1:B:443:ILE:HG12	2.47	0.45
3:E:46:LYS:O	3:E:49:LEU:HG	2.17	0.45
3:E:157:HIS:O	3:E:162:GLY:N	2.46	0.45
1:A:281:ARG:HD2	1:A:320:VAL:HG23	1.99	0.45
1:B:115:TYR:CG	1:B:153:HIS:HA	2.52	0.45
1:B:193:GLN:O	1:B:197:VAL:HG22	2.17	0.45
1:B:513:PHE:HZ	1:B:704:ILE:HD13	1.82	0.45
3:F:113:VAL:C	3:F:114:LEU:HD12	2.41	0.45
1:B:783:ARG:HH12	1:B:787:ARG:NE	2.15	0.45
1:B:825:LYS:O	1:B:831:LYS:HD2	2.17	0.45
1:B:834:PHE:CD1	1:B:838:PRO:HG3	2.51	0.45
1:A:217:GLU:O	1:A:221:ILE:HG12	2.17	0.45
1:B:84:PHE:HE2	1:B:94:THR:HG23	1.82	0.45
1:B:339:LEU:HD23	1:B:443:ILE:HG12	1.98	0.45
2:C:71:ILE:HG12	2:C:111:PHE:HE1	1.82	0.45
1:A:877:MET:O	1:A:881:LEU:HD23	2.17	0.45
1:A:901:ALA:O	1:A:904:ARG:HG3	2.17	0.45
1:B:35:LYS:HA	1:B:51:ILE:HD12	1.99	0.45
1:B:684:MET:HE3	1:B:689:VAL:HG11	1.98	0.45
1:B:789:GLN:O	1:B:793:ARG:NE	2.32	0.45
3:E:94:ASP:OD1	3:E:95:PRO:HD2	2.17	0.45
1:A:879:SER:O	1:A:882:GLN:N	2.50	0.44
1:A:920:LYS:HA	1:A:923:ASN:ND2	2.31	0.44
1:B:615:LYS:O	1:B:618:SER:OG	2.25	0.44
3:F:49:LEU:HA	3:F:52:THR:HG22	1.99	0.44
3:F:69:MET:HG3	3:F:70:ILE:N	2.31	0.44
1:A:642:SER:HA	1:A:645:GLN:HG2	2.00	0.44
1:B:118:SER:OG	1:B:121:PHE:O	2.27	0.44
1:A:713:ILE:HD13	1:A:722:TYR:HE2	1.82	0.44
1:A:829:TRP:HE1	3:F:86:PHE:HE1	1.65	0.44
1:B:454:GLN:N	1:B:454:GLN:OE1	2.51	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:B:870:ARG:HH22	1:B:873:LEU:HD23	1.83	0.44
1:A:339:LEU:HD13	1:A:443:ILE:HG12	1.98	0.44
1:B:791:GLN:OE1	2:C:86:ASN:ND2	2.50	0.44
2:C:188:PHE:O	2:C:192:ILE:HG23	2.17	0.44
1:B:500:GLU:HG2	1:B:764:PHE:HZ	1.81	0.44
1:B:576:HIS:CE1	1:B:590:ILE:HG12	2.53	0.44
2:D:88:THR:HG23	2:D:91:GLU:H	1.83	0.44
3:F:22:GLU:OE1	3:F:24:THR:HG22	2.17	0.44
1:A:918:LYS:O	1:A:922:MET:HG3	2.17	0.44
1:B:442:ARG:NH1	1:B:446:THR:HB	2.32	0.44
1:B:724:ILE:HG22	1:B:780:ARG:HG3	1.99	0.44
2:D:73:TYR:HB3	2:D:104:LEU:HD12	1.98	0.44
1:A:676:ASN:N	1:A:676:ASN:ND2	2.66	0.44
1:B:35:LYS:HA	1:B:51:ILE:HB	1.99	0.44
1:B:109:TYR:CD2	1:B:684:MET:HB2	2.52	0.44
2:D:100:ARG:O	2:D:104:LEU:N	2.51	0.44
3:E:49:LEU:O	3:E:52:THR:OG1	2.19	0.44
1:A:739:ARG:O	1:A:743:GLU:HG2	2.17	0.43
1:A:641:GLY:O	1:A:645:GLN:HG2	2.18	0.43
1:A:870:ARG:HG3	1:B:869:ARG:HH12	1.82	0.43
1:B:115:TYR:OH	1:B:187:ASN:OD1	2.36	0.43
1:B:483:GLU:OE2	1:B:581:HIS:HB3	2.18	0.43
1:B:513:PHE:CZ	1:B:704:ILE:HD13	2.53	0.43
3:F:67:ASP:HA	3:F:70:ILE:HG12	1.99	0.43
3:F:97:GLU:O	3:F:101:ASN:ND2	2.51	0.43
1:A:746:LEU:HD13	1:A:756:TYR:CE2	2.54	0.43
1:B:791:GLN:HB3	2:C:192:ILE:HD12	2.00	0.43
1:A:709:PHE:HZ	1:A:757:LYS:HE2	1.83	0.43
1:B:426:ALA:HA	1:B:429:LYS:HE3	2.00	0.43
1:B:836:ILE:HG12	1:B:840:LEU:HD12	2.00	0.43
1:B:837:LYS:HG3	3:E:32:ALA:HB1	2.00	0.43
2:C:49:GLU:HA	2:C:52:GLU:OE2	2.18	0.43
3:F:155:LEU:HD13	3:F:158:ILE:HD11	2.00	0.43
1:A:725:LEU:HD23	1:A:780:ARG:HG3	2.00	0.43
1:A:789:GLN:HE22	2:D:162:GLU:H	1.66	0.43
2:D:154:ARG:NE	2:D:173:MET:SD	2.92	0.43
3:E:112:GLY:HA3	3:E:150:LEU:O	2.18	0.43
1:B:857:THR:O	1:B:861:GLU:HG3	2.19	0.43
2:C:121:ILE:HA	2:C:124:ASN:OD1	2.19	0.43
3:E:47:ASN:HA	3:E:50:ARG:NE	2.33	0.43
1:A:288:GLN:NE2	1:A:328:GLU:HB3	2.34	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:861:GLU:HA	1:A:864:GLU:CD	2.44	0.43
1:B:435:MET:HB2	1:B:620:LEU:HD21	2.01	0.43
1:B:480:PHE:O	1:B:484:LYS:HG3	2.19	0.43
1:B:719:ARG:O	1:B:723:ARG:HB2	2.19	0.43
1:B:834:PHE:CZ	3:E:161:HIS:HB2	2.54	0.43
1:B:28:THR:O	1:B:30:PRO:HD3	2.19	0.43
1:B:215:THR:O	1:B:219:GLN:N	2.45	0.43
2:C:73:TYR:HE2	2:C:99:PRO:HB3	1.83	0.43
3:E:29:PHE:O	3:E:32:ALA:HB3	2.19	0.43
1:A:97:HIS:NE2	1:A:100:ALA:HB2	2.34	0.42
1:A:382:ASP:HA	1:A:392:SER:HB2	2.01	0.42
1:B:349:MET:HE1	1:B:435:MET:HG2	2.00	0.42
1:B:480:PHE:CE2	1:B:484:LYS:HD2	2.54	0.42
1:A:45:GLU:H	1:A:686:ASN:HB3	1.85	0.42
1:A:494:PHE:HD2	1:A:513:PHE:CD2	2.37	0.42
1:A:894:GLU:O	1:A:898:LEU:HD12	2.18	0.42
1:B:749:LEU:HD23	1:B:749:LEU:HA	1.93	0.42
1:A:184:LYS:HB2	1:A:184:LYS:HE2	1.86	0.42
1:A:403:ARG:HH21	1:A:410:TYR:HB2	1.84	0.42
1:A:836:ILE:HG23	1:A:840:LEU:HD21	2.02	0.42
1:B:375:PRO:HB3	1:B:378:THR:HG21	2.01	0.42
1:B:724:ILE:HD12	1:B:724:ILE:H	1.84	0.42
1:B:904:ARG:HA	1:B:907:GLN:HG3	2.00	0.42
2:C:70:LYS:NZ	2:C:110:ASP:HB3	2.34	0.42
3:E:19:SER:OG	3:E:20:MET:N	2.53	0.42
3:E:30:LYS:NZ	3:E:80:THR:O	2.53	0.42
1:A:230:PHE:HB2	1:A:439:MET:HE1	2.02	0.42
1:B:705:CYS:O	1:B:767:ALA:HB2	2.19	0.42
3:F:22:GLU:H	3:F:93:ALA:HB3	1.85	0.42
1:A:249:ARG:O	1:A:261:ALA:HA	2.19	0.42
1:B:143:ARG:HD2	1:B:198:ILE:HD12	2.02	0.42
1:B:899:ALA:HA	1:B:902:GLU:OE1	2.20	0.42
3:F:154:ASN:O	3:F:158:ILE:HG12	2.20	0.42
1:A:237:ARG:NH2	1:A:467:ILE:O	2.50	0.42
1:A:282:ASP:OD1	1:A:283:TYR:N	2.42	0.42
1:A:479:ASN:HB3	1:A:581:HIS:CE1	2.55	0.42
1:A:848:GLU:HG2	1:A:849:MET:SD	2.60	0.42
1:B:273:VAL:HG23	1:B:274:ILE:HG23	2.02	0.42
1:B:784:ILE:HD13	1:B:784:ILE:HA	1.91	0.42
2:C:88:THR:OG1	2:C:162:GLU:OE2	2.38	0.42
1:A:513:PHE:CE2	1:A:704:ILE:HD13	2.54	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:635:LYS:HA	1:A:903:GLU:CD	2.44	0.42
1:B:3:ASP:N	1:B:3:ASP:OD1	2.52	0.42
2:C:73:TYR:HD2	2:C:104:LEU:HA	1.84	0.42
3:F:94:ASP:N	3:F:94:ASP:OD1	2.51	0.42
1:A:260:SER:HB2	1:A:453:ARG:HD3	2.01	0.42
1:B:804:LEU:HA	1:B:807:ARG:HB2	2.02	0.42
1:B:822:MET:SD	3:E:137:GLN:NE2	2.91	0.42
3:F:97:GLU:HA	3:F:100:LEU:HD12	2.02	0.42
1:A:908:LEU:HB3	1:A:912:LYS:HZ1	1.82	0.41
1:B:837:LYS:NZ	3:E:36:MET:HB3	2.35	0.41
1:B:841:LYS:NZ	3:E:51:ASP:O	2.53	0.41
3:E:22:GLU:HA	3:E:26:ILE:HB	2.02	0.41
1:A:281:ARG:HH21	1:A:287:TYR:HB2	1.86	0.41
1:A:859:LEU:O	1:A:863:LEU:HG	2.19	0.41
1:B:655:LEU:HB3	1:B:659:MET:HE1	2.02	0.41
1:B:615:LYS:O	1:B:619:THR:HG23	2.20	0.41
1:B:83:LYS:HD2	1:B:84:PHE:CD1	2.55	0.41
1:B:773:LEU:HD23	1:B:773:LEU:HA	1.88	0.41
3:E:50:ARG:HG3	3:E:53:PHE:CE2	2.56	0.41
1:A:840:LEU:HB3	3:F:31:GLU:OE2	2.20	0.41
1:B:576:HIS:CG	1:B:590:ILE:HG23	2.56	0.41
2:D:173:MET:HB3	2:D:176:GLN:HB2	2.02	0.41
1:A:416:ASN:O	1:A:420:VAL:HG22	2.20	0.41
1:B:442:ARG:HH12	1:B:446:THR:HB	1.86	0.41
1:A:75:GLN:H	1:A:75:GLN:CD	2.28	0.41
1:A:272:ARG:HH12	1:A:280:GLU:HB3	1.85	0.41
1:A:553:PHE:HE2	1:A:565:LYS:HG2	1.86	0.41
1:A:367:LYS:O	1:A:370:GLU:HG2	2.20	0.41
1:A:579:LEU:O	1:A:585:ILE:HG23	2.21	0.41
1:A:676:ASN:N	1:A:676:ASN:HD22	2.17	0.41
1:B:418:GLN:NE2	1:B:419:GLN:HG3	2.35	0.41
1:B:709:PHE:HB3	1:B:764:PHE:HB3	2.01	0.41
1:B:719:ARG:HD3	1:B:730:ILE:HG21	2.02	0.41
1:B:914:GLN:O	1:B:918:LYS:HB2	2.21	0.41
1:A:281:ARG:HH21	1:A:287:TYR:CB	2.34	0.41
1:A:349:MET:HE1	1:A:439:MET:SD	2.61	0.41
1:A:405:LYS:HB2	1:A:410:TYR:CE1	2.56	0.41
1:A:415:GLN:HB3	1:A:420:VAL:HG13	2.03	0.41
1:A:801:TYR:O	1:A:805:LEU:HG	2.20	0.41
1:A:874:GLU:CD	1:B:869:ARG:HH21	2.23	0.41
1:A:879:SER:O	1:A:883:GLU:OE1	2.39	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:102:LEU:HD21	1:A:686:ASN:ND2	2.34	0.41
1:A:234:LYS:HB3	1:A:281:ARG:HB2	2.02	0.41
1:A:818:ILE:O	1:A:822:MET:HG2	2.21	0.41
3:F:67:ASP:C	3:F:71:LYS:HZ3	2.29	0.41
1:A:222:GLN:C	1:A:225:PRO:HD2	2.46	0.40
1:B:270:LYS:HB3	1:B:429:LYS:HD3	2.03	0.40
1:B:288:GLN:HA	1:B:325:ASP:HB3	2.02	0.40
1:B:524:ILE:HG22	1:B:531:MET:HE2	2.03	0.40
1:B:580:ILE:HG12	1:B:585:ILE:HD13	2.03	0.40
1:B:727:PRO:HG2	2:C:132:ASP:HA	2.02	0.40
2:C:133:PHE:N	2:C:133:PHE:CD1	2.88	0.40
1:A:109:TYR:CD2	1:A:684:MET:HE3	2.56	0.40
1:A:390:LEU:HD11	1:A:609:TYR:CE1	2.55	0.40
1:B:272:ARG:HB3	1:B:283:TYR:CE2	2.56	0.40
1:B:364:PHE:HB2	1:B:417:VAL:HG23	2.02	0.40
1:B:421:ILE:HA	1:B:424:THR:HG22	2.02	0.40
2:D:130:TYR:CE1	2:D:190:LYS:HE3	2.56	0.40
3:E:95:PRO:O	3:E:99:ILE:HG12	2.22	0.40
3:F:142:PHE:CG	3:F:143:PRO:HD3	2.56	0.40
1:B:288:GLN:O	1:B:329:LEU:HD22	2.22	0.40
1:B:915:LEU:HD23	1:B:918:LYS:HD3	2.02	0.40
3:E:151:ASP:O	3:E:154:ASN:ND2	2.55	0.40
1:A:75:GLN:OE1	1:A:75:GLN:N	2.51	0.40
1:A:535:GLU:OE1	1:A:652:ARG:NH2	2.38	0.40
1:A:569:ILE:HG23	1:A:570:LYS:HG2	2.04	0.40
1:B:849:MET:O	1:B:853:LYS:HG2	2.21	0.40
2:D:186:GLU:HA	2:D:189:VAL:HG12	2.03	0.40
3:E:39:ASN:OD1	3:E:39:ASN:N	2.51	0.40
3:F:116:ALA:HB3	3:F:141:ALA:HB2	2.02	0.40
3:E:124:THR:HG23	3:E:130:PHE:H	1.87	0.40

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles [i](#)

5.3.1 Protein backbone [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	908/1935 (47%)	880 (97%)	28 (3%)	0	100	100
1	B	869/1935 (45%)	834 (96%)	34 (4%)	1 (0%)	48	79
2	C	155/195 (80%)	152 (98%)	3 (2%)	0	100	100
2	D	156/195 (80%)	154 (99%)	2 (1%)	0	100	100
3	E	131/166 (79%)	123 (94%)	8 (6%)	0	100	100
3	F	135/166 (81%)	125 (93%)	10 (7%)	0	100	100
All	All	2354/4592 (51%)	2268 (96%)	85 (4%)	1 (0%)	100	100

All (1) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	B	130	TRP

5.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	792/1693 (47%)	791 (100%)	1 (0%)	88	92
1	B	772/1693 (46%)	772 (100%)	0	100	100
2	C	137/167 (82%)	137 (100%)	0	100	100
2	D	138/167 (83%)	138 (100%)	0	100	100
3	E	120/141 (85%)	120 (100%)	0	100	100
3	F	120/141 (85%)	120 (100%)	0	100	100
All	All	2079/4002 (52%)	2078 (100%)	1 (0%)	100	100

All (1) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	676	ASN

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (24) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	44	GLN
1	A	97	HIS
1	A	232	ASN
1	A	288	GLN
1	A	306	ASN
1	A	645	GLN
1	A	895	GLN
1	B	288	GLN
1	B	292	ASN
1	B	372	GLN
1	B	482	ASN
1	B	518	GLN
1	B	576	HIS
1	B	651	HIS
1	B	666	HIS
1	B	755	GLN
2	C	50	GLN
2	D	101	GLN
2	D	124	ASN
3	F	25	GLN
3	F	63	ASN
3	F	78	ASN
3	F	137	GLN
3	F	161	HIS

5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

5.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains ⓘ

4 non-standard protein/DNA/RNA residues 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
1	M3L	B	129	1	10,11,12	0.53	0	9,14,16	0.46	0
1	M3L	A	549	1	10,11,12	0.55	0	9,14,16	0.51	0
1	M3L	B	549	1	10,11,12	0.53	0	9,14,16	0.47	0
1	M3L	A	129	1	10,11,12	0.51	0	9,14,16	0.48	0

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
1	M3L	B	129	1	-	4/9/10/12	-
1	M3L	A	549	1	-	1/9/10/12	-
1	M3L	B	549	1	-	0/9/10/12	-
1	M3L	A	129	1	-	0/9/10/12	-

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

All (5) torsion outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms
1	B	129	M3L	N-CA-CB-CG
1	B	129	M3L	C-CA-CB-CG
1	B	129	M3L	CG-CD-CE-NZ
1	B	129	M3L	CA-CB-CG-CD
1	A	549	M3L	CE-CD-CG-CB

There are no ring outliers.

1 monomer is involved in 1 short contact:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
1	B	129	M3L	1	0

5.5 Carbohydrates

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry

Of 6 ligands modelled in this entry, 2 are monoatomic - leaving 4 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
5	PO4	B	2002	6	4,4,4	1.02	0	6,6,6	0.39	0
4	ADP	B	2001	6	27,29,29	1.34	4 (14%)	42,45,45	2.00	10 (23%)
4	ADP	A	2001	6	27,29,29	1.35	4 (14%)	42,45,45	1.98	11 (26%)
5	PO4	A	2002	6	4,4,4	1.11	0	6,6,6	0.38	0

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
4	ADP	B	2001	6	-	4/16/32/32	0/3/3/3
4	ADP	A	2001	6	-	4/16/32/32	0/3/3/3

All (8) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
4	A	2001	ADP	C5-C4	4.36	1.47	1.39
4	B	2001	ADP	C5-C4	4.34	1.47	1.39
4	A	2001	ADP	C5-C6	2.69	1.48	1.41
4	B	2001	ADP	C5-C6	2.55	1.48	1.41
4	B	2001	ADP	C5-N7	-2.33	1.34	1.39
4	A	2001	ADP	C5-N7	-2.30	1.34	1.39
4	B	2001	ADP	C8-N7	2.29	1.35	1.31
4	A	2001	ADP	C8-N7	2.22	1.35	1.31

All (21) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
4	A	2001	ADP	C5-C4-N3	-6.39	118.41	126.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
4	B	2001	ADP	C5-C4-N3	-6.22	118.64	126.75
4	B	2001	ADP	N3-C4-N9	4.96	135.25	127.08
4	A	2001	ADP	N3-C4-N9	4.90	135.16	127.08
4	B	2001	ADP	PA-O3A-PB	-4.01	119.06	132.83
4	A	2001	ADP	C2-N3-C4	3.92	121.02	111.75
4	B	2001	ADP	C2-N3-C4	3.81	120.76	111.75
4	A	2001	ADP	C4-C5-N7	-3.34	106.55	110.62
4	B	2001	ADP	C4-C5-N7	-3.10	106.84	110.62
4	B	2001	ADP	N3-C2-N1	-3.03	123.86	128.60
4	A	2001	ADP	N3-C2-N1	-3.02	123.89	128.60
4	A	2001	ADP	PA-O3A-PB	-2.83	123.13	132.83
4	A	2001	ADP	C5-N7-C8	2.76	107.44	103.51
4	A	2001	ADP	C3'-C2'-C1'	2.72	106.59	101.43
4	B	2001	ADP	C5-N7-C8	2.68	107.32	103.51
4	B	2001	ADP	C4-N9-C8	2.65	108.60	105.73
4	B	2001	ADP	C3'-C2'-C1'	2.47	106.11	101.43
4	A	2001	ADP	C4-N9-C8	2.36	108.29	105.73
4	A	2001	ADP	C6-C5-N7	2.15	136.03	132.02
4	A	2001	ADP	O3B-PB-O2B	2.06	115.49	107.64
4	B	2001	ADP	N9-C8-N7	-2.04	111.12	113.91

There are no chirality outliers.

All (8) torsion outliers are listed below:

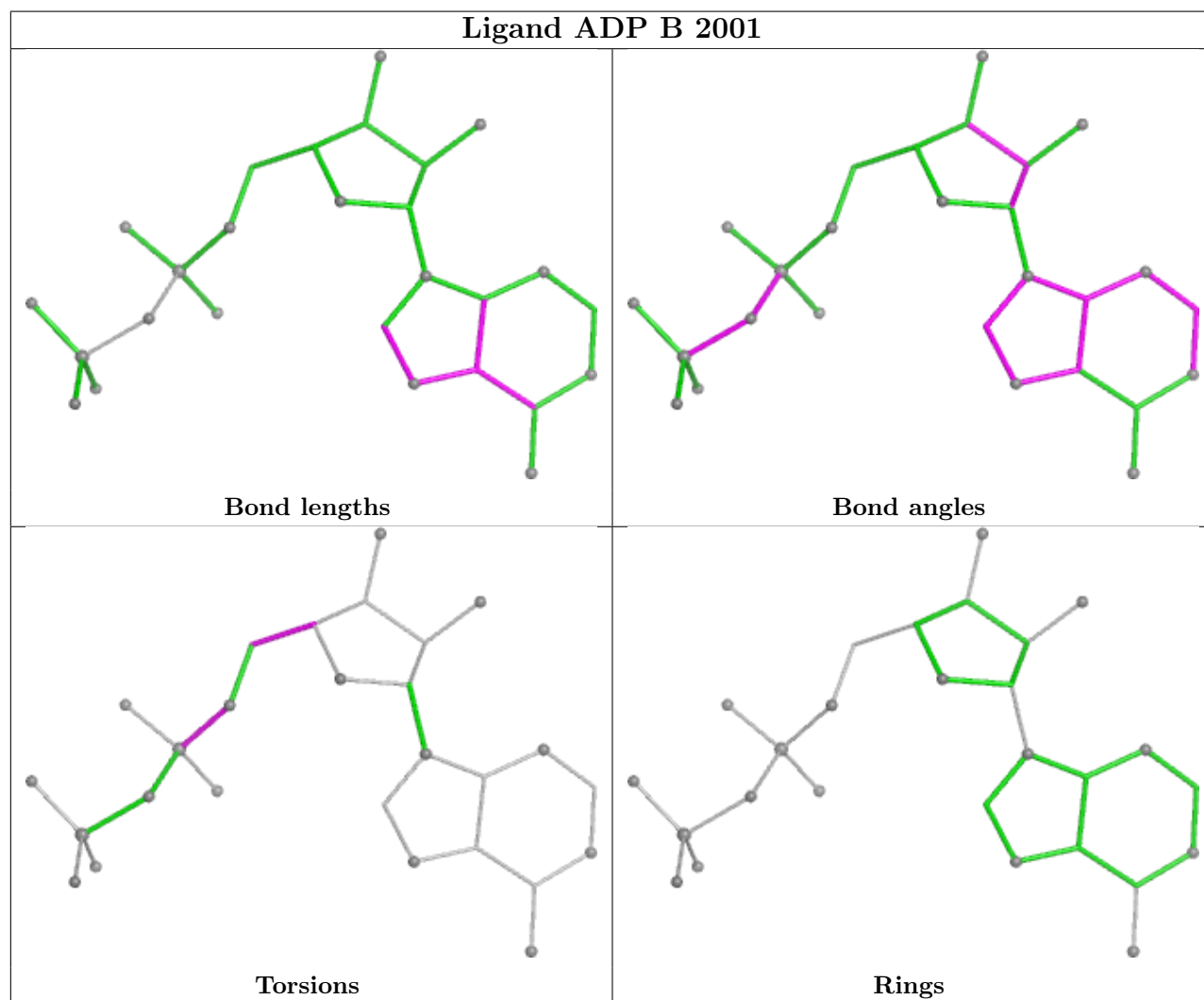
Mol	Chain	Res	Type	Atoms
4	A	2001	ADP	C5'-O5'-PA-O3A
4	A	2001	ADP	O4'-C4'-C5'-O5'
4	A	2001	ADP	C3'-C4'-C5'-O5'
4	B	2001	ADP	C5'-O5'-PA-O1A
4	B	2001	ADP	O4'-C4'-C5'-O5'
4	B	2001	ADP	C3'-C4'-C5'-O5'
4	A	2001	ADP	C5'-O5'-PA-O1A
4	B	2001	ADP	C5'-O5'-PA-O3A

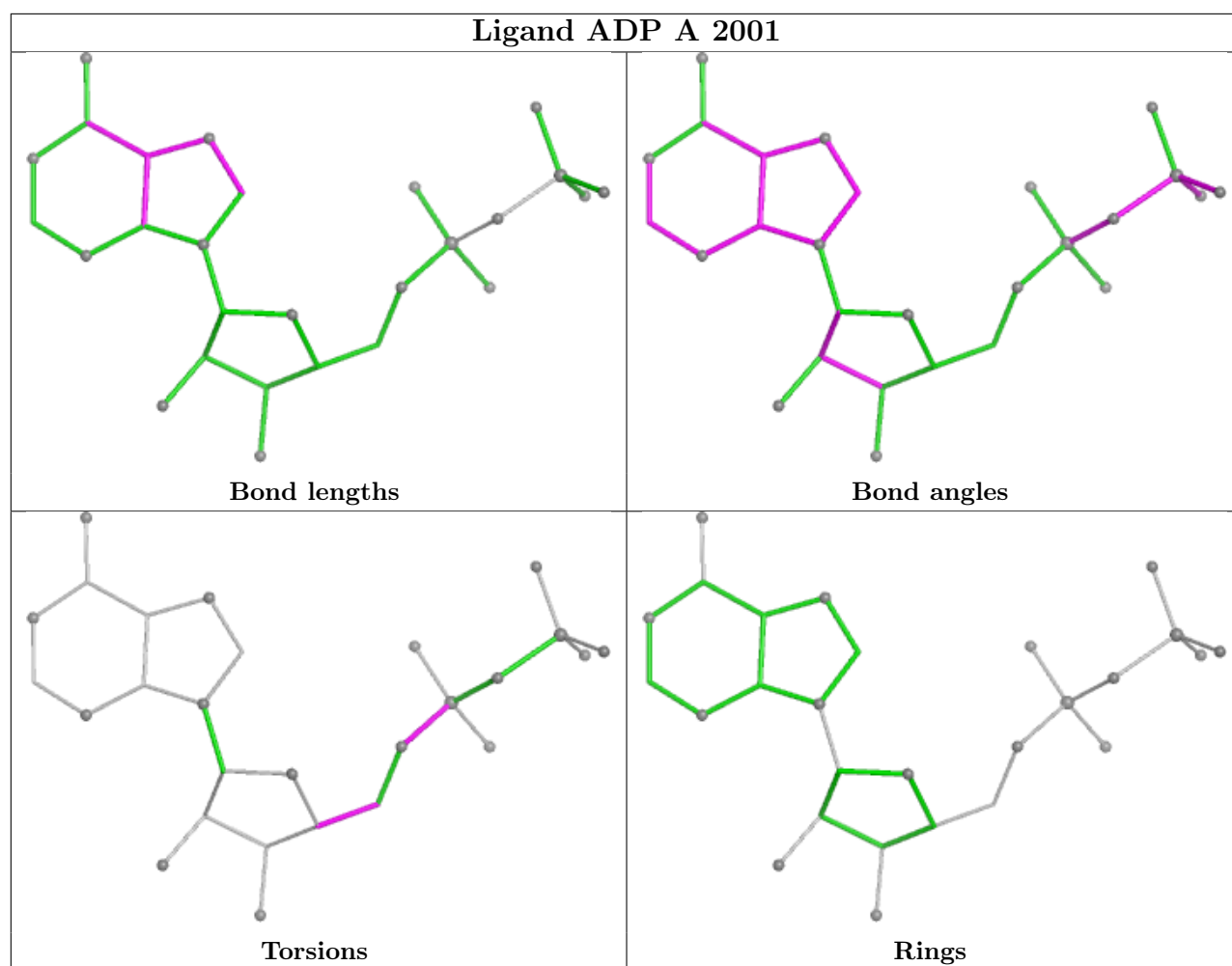
There are no ring outliers.

2 monomers are involved in 5 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
4	B	2001	ADP	2	0
4	A	2001	ADP	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.





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.

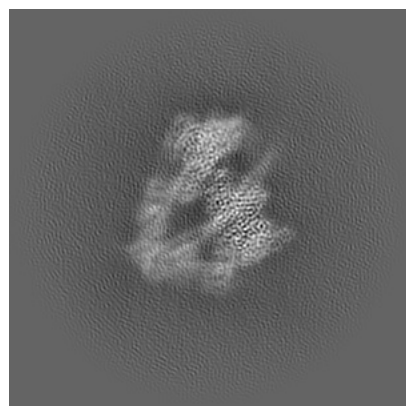
6 Map visualisation [i](#)

This section contains visualisations of the EMDB entry EMD-56106. These allow visual inspection of the internal detail of the map and identification of artifacts.

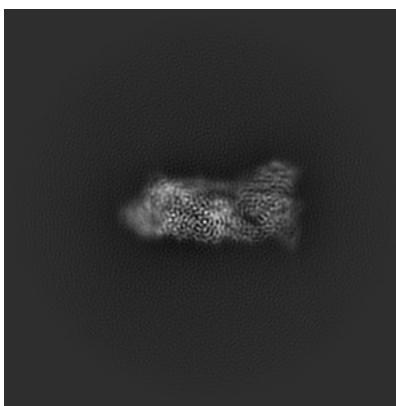
Images derived from a raw map, generated by summing the deposited half-maps, are presented below the corresponding image components of the primary map to allow further visual inspection and comparison with those of the primary map.

6.1 Orthogonal projections [i](#)

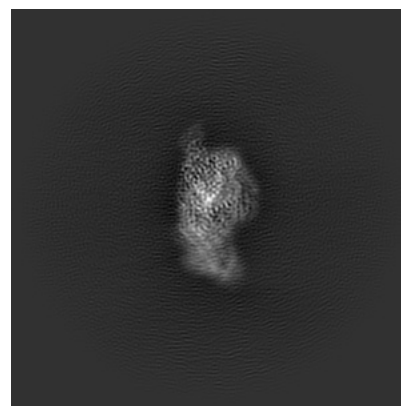
6.1.1 Primary map



X

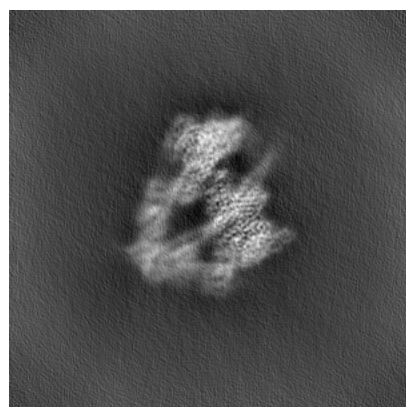


Y

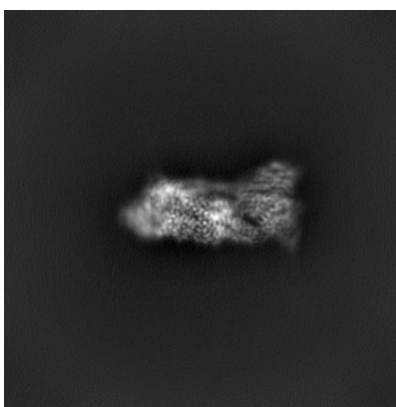


Z

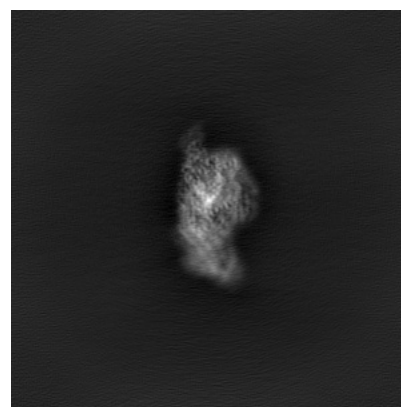
6.1.2 Raw map



X



Y

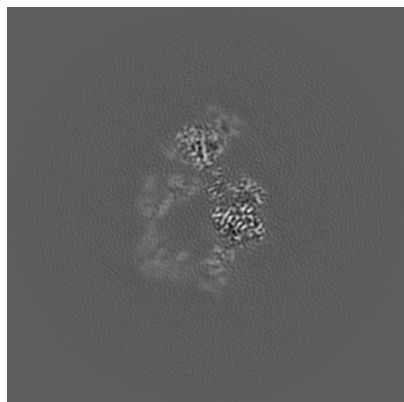


Z

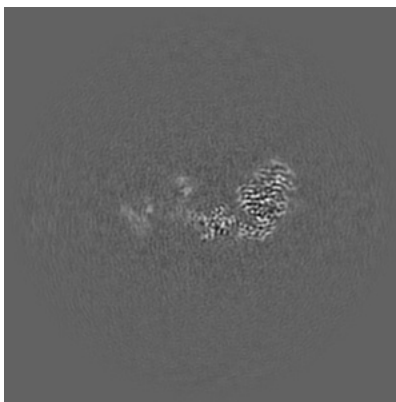
The images above show the map projected in three orthogonal directions.

6.2 Central slices [i](#)

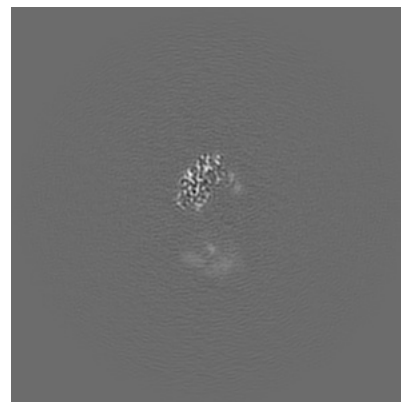
6.2.1 Primary map



X Index: 150

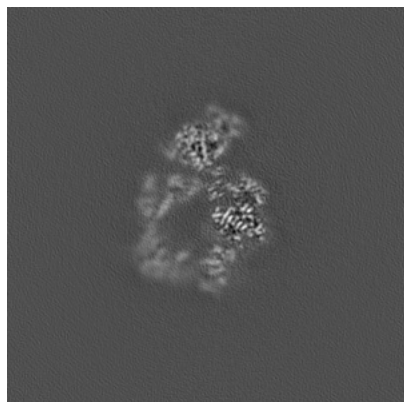


Y Index: 150

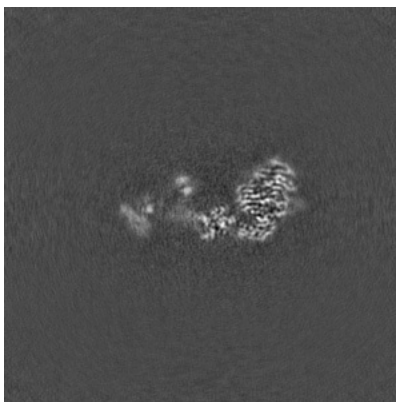


Z Index: 150

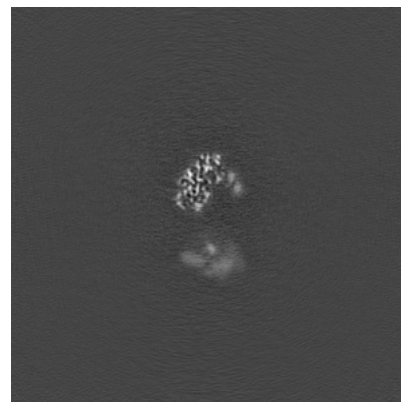
6.2.2 Raw map



X Index: 150



Y Index: 150

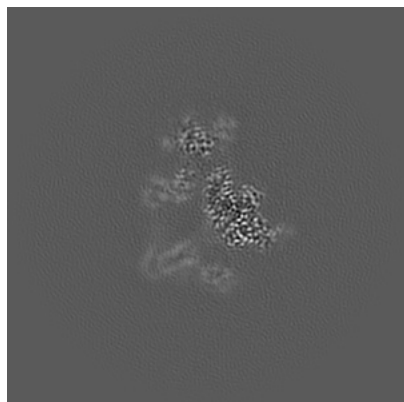


Z Index: 150

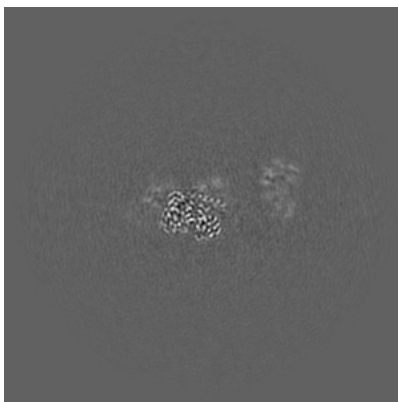
The images above show central slices of the map in three orthogonal directions.

6.3 Largest variance slices [i](#)

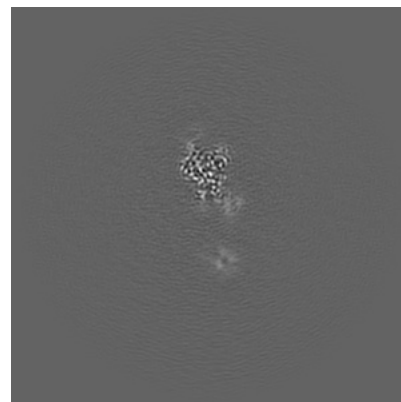
6.3.1 Primary map



X Index: 142

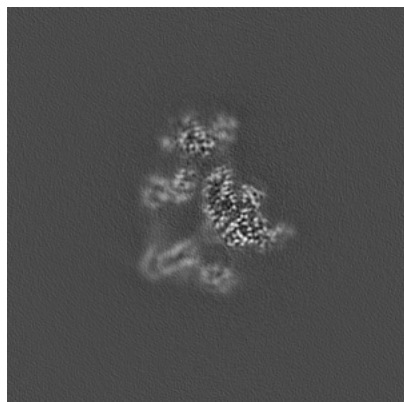


Y Index: 170

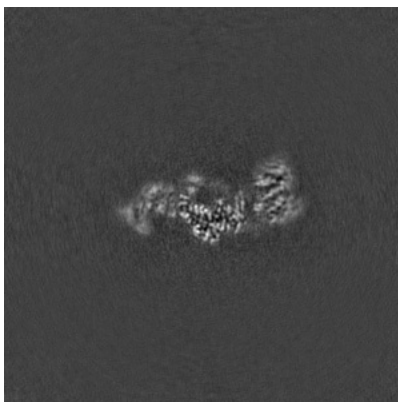


Z Index: 137

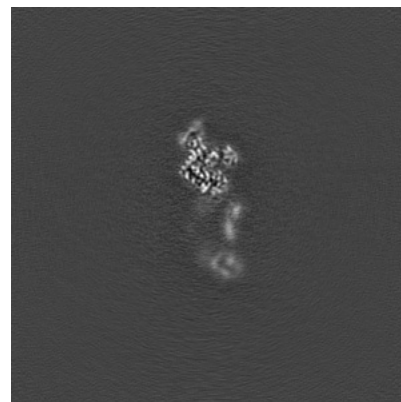
6.3.2 Raw map



X Index: 142



Y Index: 158

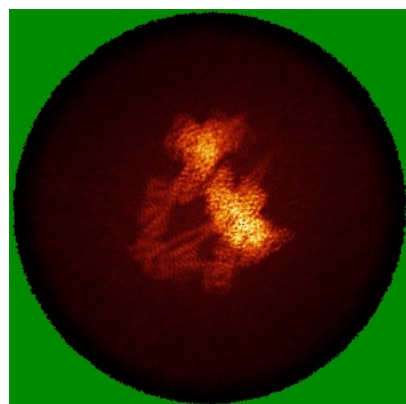


Z Index: 130

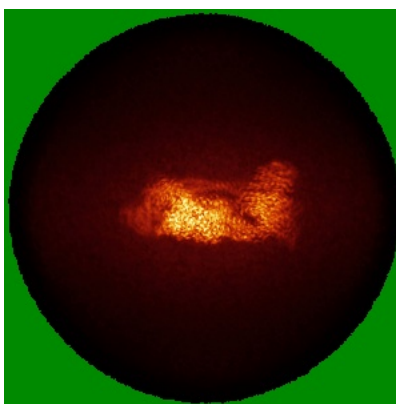
The images above show the largest variance slices of the map in three orthogonal directions.

6.4 Orthogonal standard-deviation projections (False-color) [i](#)

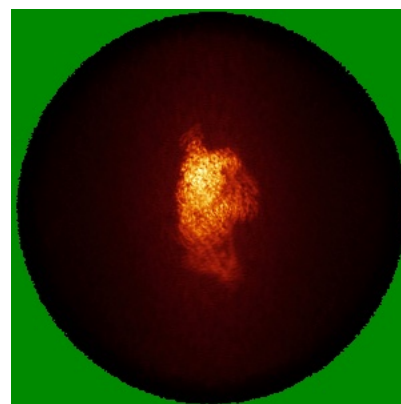
6.4.1 Primary map



X

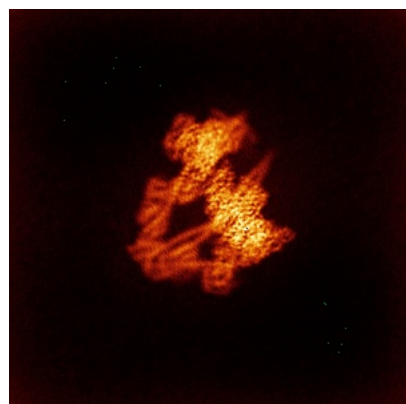


Y

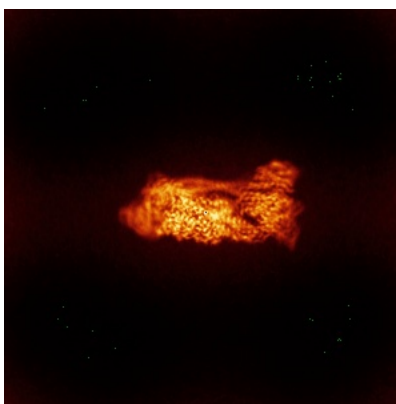


Z

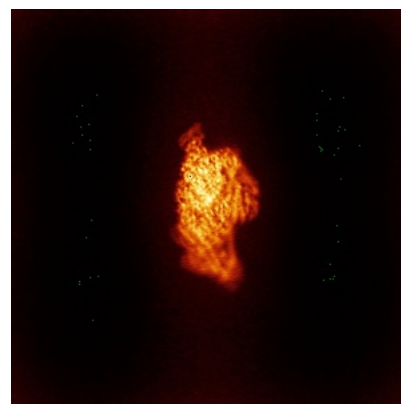
6.4.2 Raw map



X



Y

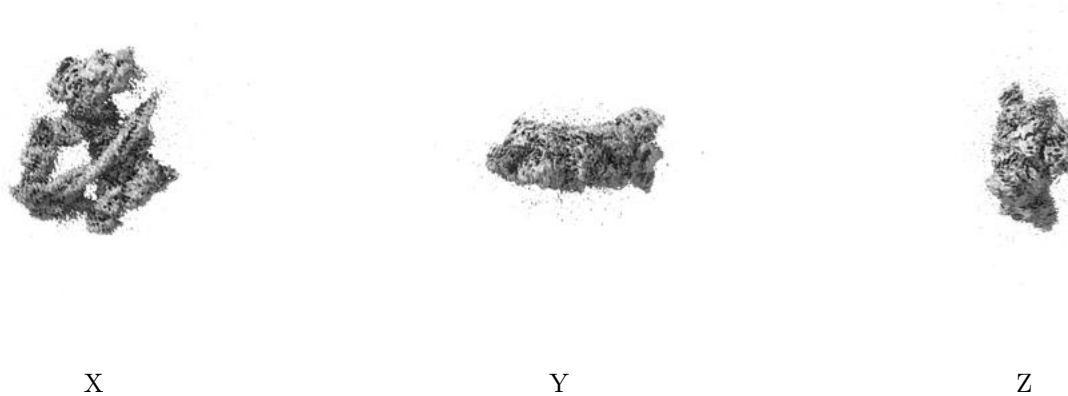


Z

The images above show the map standard deviation projections with false color in three orthogonal directions. Minimum values are shown in green, max in blue, and dark to light orange shades represent small to large values respectively.

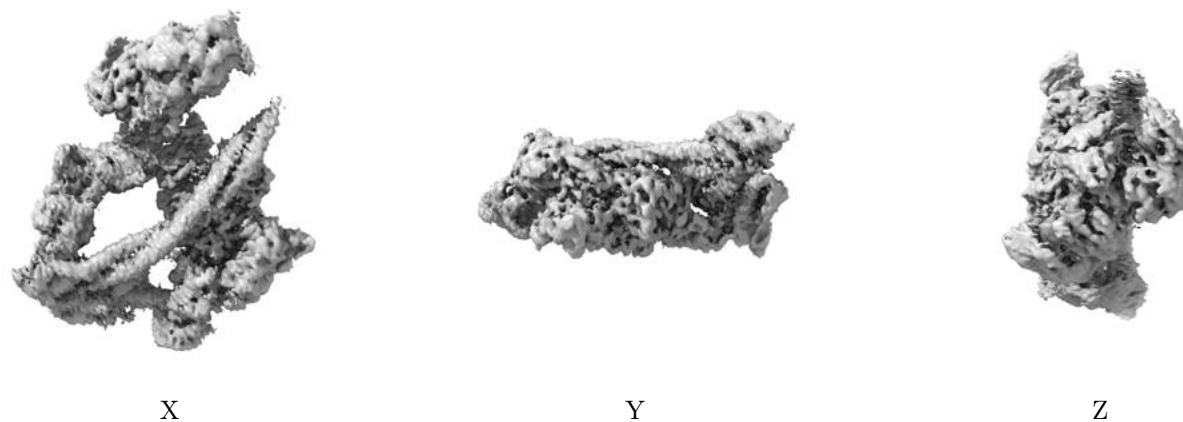
6.5 Orthogonal surface views [i](#)

6.5.1 Primary map



The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.126. These images, in conjunction with the slice images, may facilitate assessment of whether an appropriate contour level has been provided.

6.5.2 Raw map



These images show the 3D surface of the raw map. The raw map's contour level was selected so that its surface encloses the same volume as the primary map does at its recommended contour level.

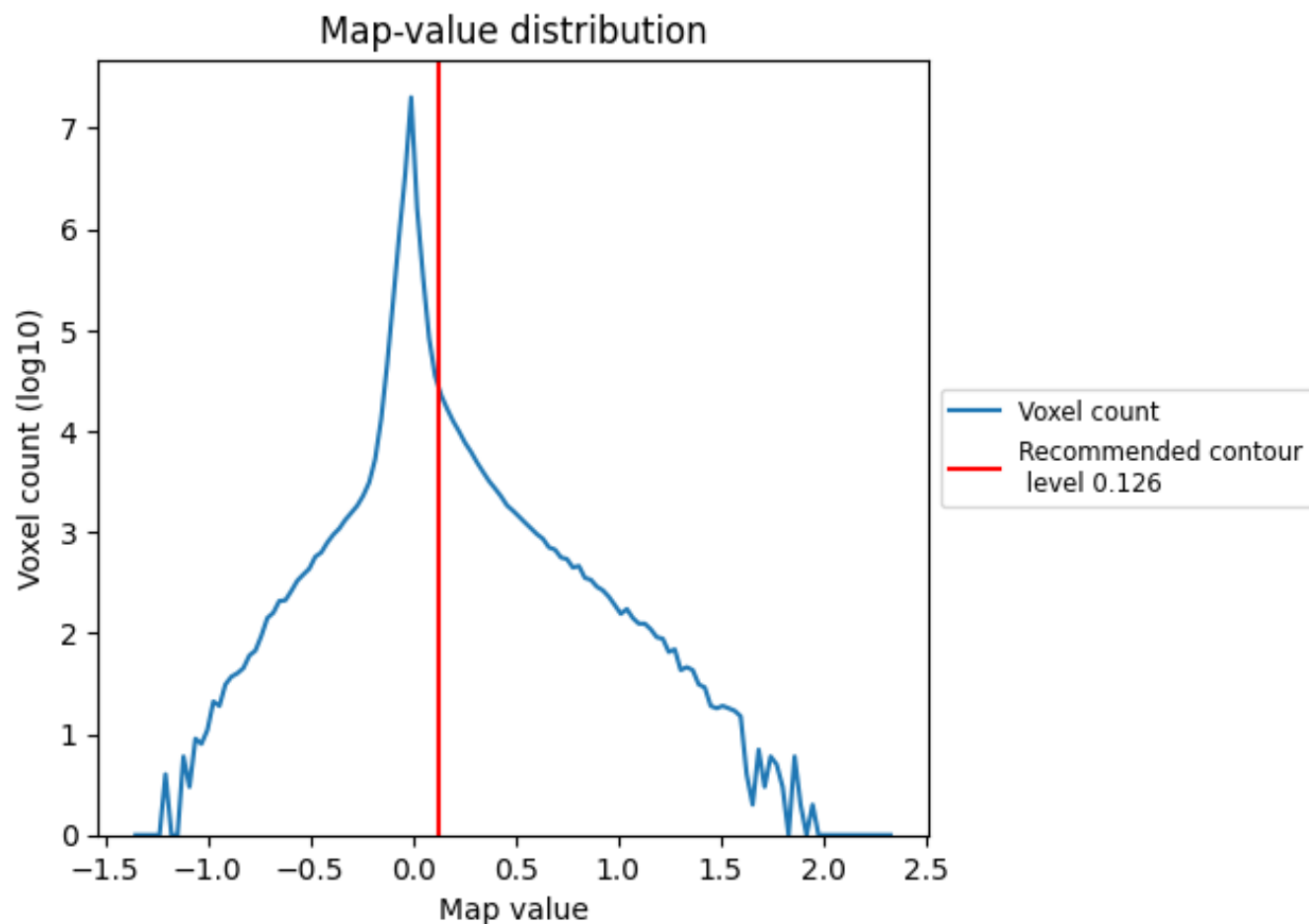
6.6 Mask visualisation [i](#)

This section was not generated. No masks/segmentation were deposited.

7 Map analysis [i](#)

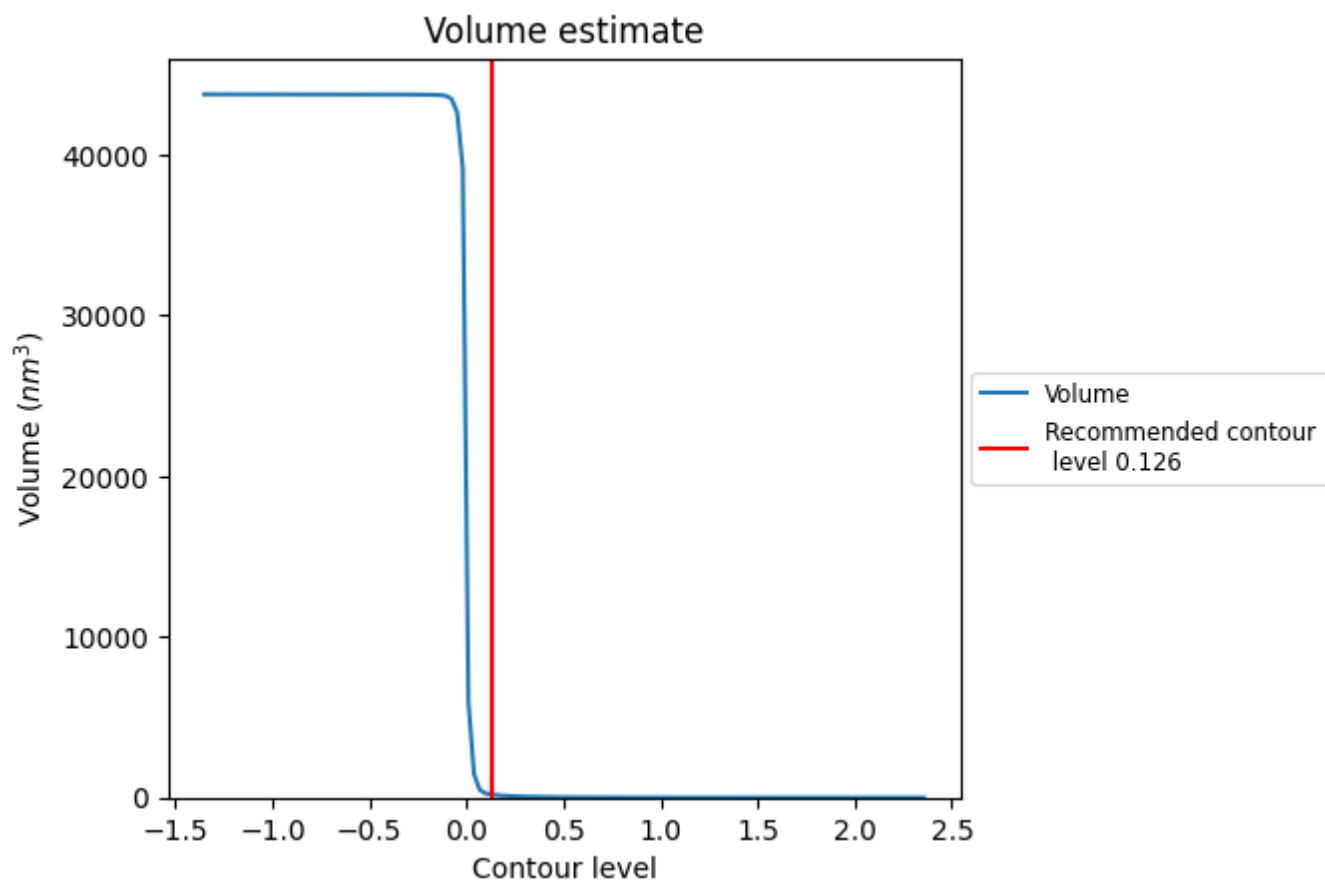
This section contains the results of statistical analysis of the map.

7.1 Map-value distribution [i](#)



The map-value distribution is plotted in 128 intervals along the x-axis. The y-axis is logarithmic. A spike in this graph at zero usually indicates that the volume has been masked.

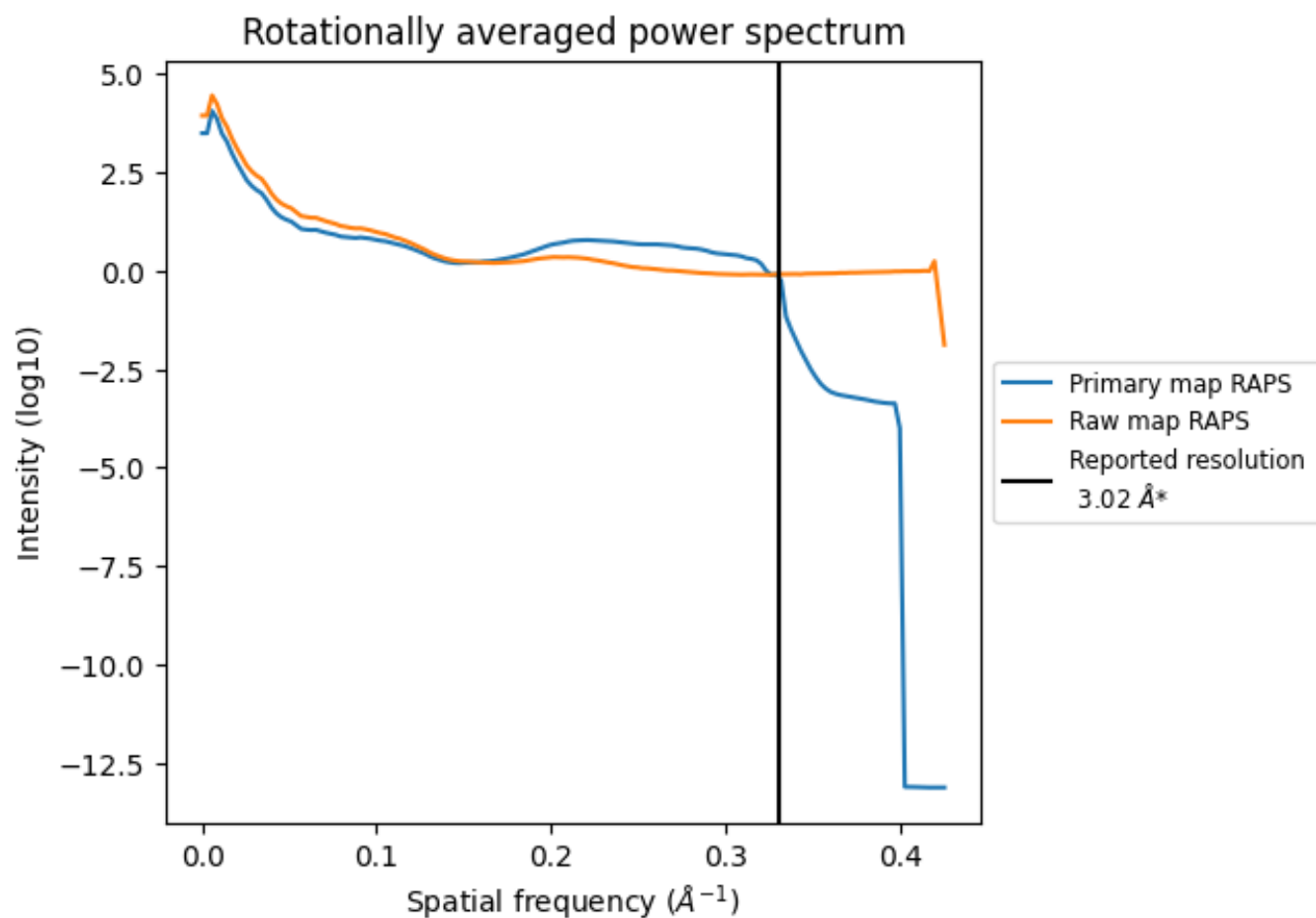
7.2 Volume estimate [i](#)



The volume at the recommended contour level is 194 nm³; this corresponds to an approximate mass of 175 kDa.

The volume estimate graph shows how the enclosed volume varies with the contour level. The recommended contour level is shown as a vertical line and the intersection between the line and the curve gives the volume of the enclosed surface at the given level.

7.3 Rotationally averaged power spectrum ⓘ

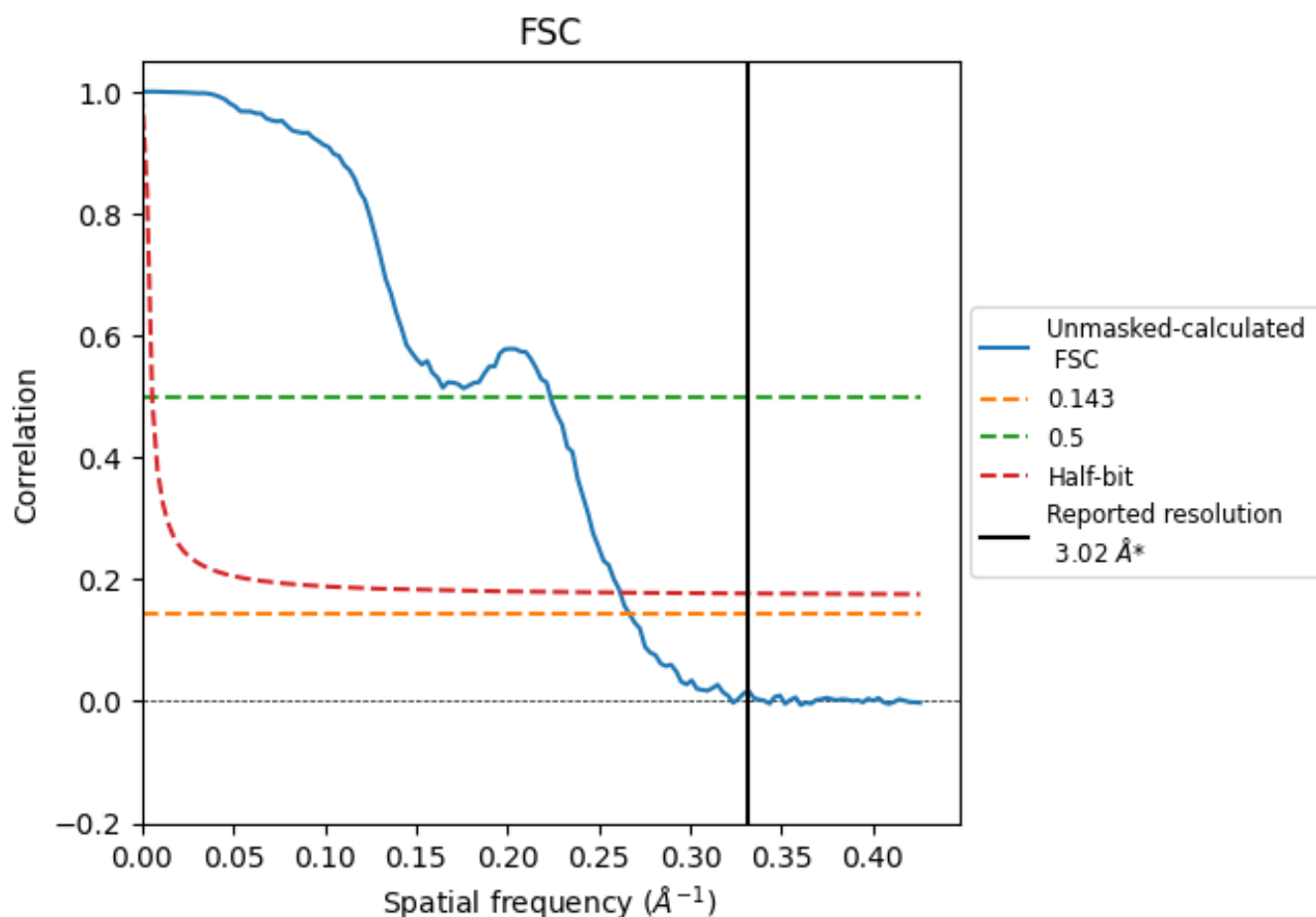


*Reported resolution corresponds to spatial frequency of 0.331 \AA^{-1}

8 Fourier-Shell correlation [i](#)

Fourier-Shell Correlation (FSC) is the most commonly used method to estimate the resolution of single-particle and subtomogram-averaged maps. The shape of the curve depends on the imposed symmetry, mask and whether or not the two 3D reconstructions used were processed from a common reference. The reported resolution is shown as a black line. A curve is displayed for the half-bit criterion in addition to lines showing the 0.143 gold standard cut-off and 0.5 cut-off.

8.1 FSC [i](#)



*Reported resolution corresponds to spatial frequency of 0.331 \AA^{-1}

8.2 Resolution estimates [i](#)

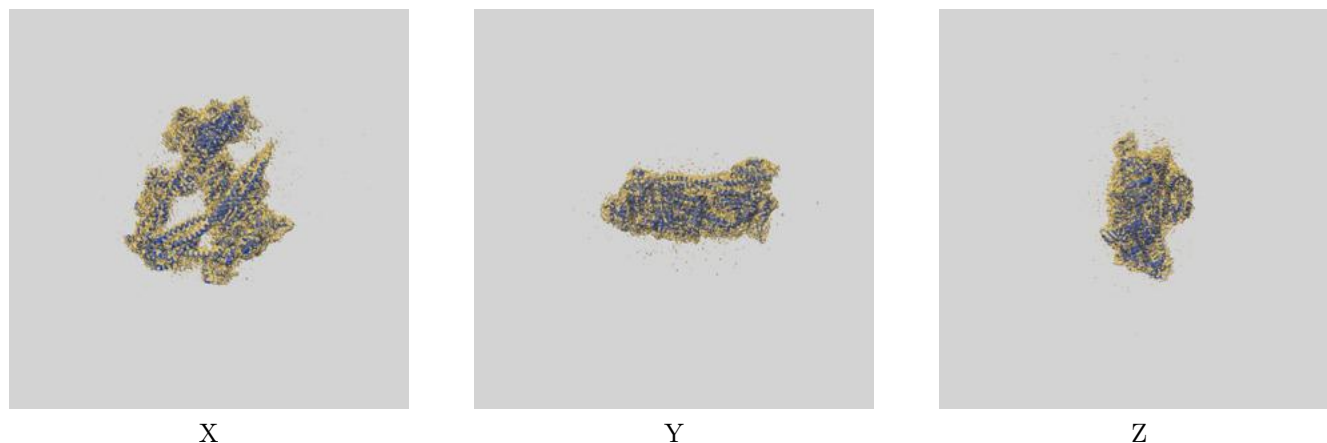
Resolution estimate (Å)	Estimation criterion (FSC cut-off)		
	0.143	0.5	Half-bit
Reported by author	3.02	-	-
Author-provided FSC curve	-	-	-
Unmasked-calculated*	3.75	4.48	3.82

*Resolution estimate based on FSC curve calculated by comparison of deposited half-maps. The value from deposited half-maps intersecting FSC 0.143 CUT-OFF 3.75 differs from the reported value 3.02 by more than 10 %

9 Map-model fit [i](#)

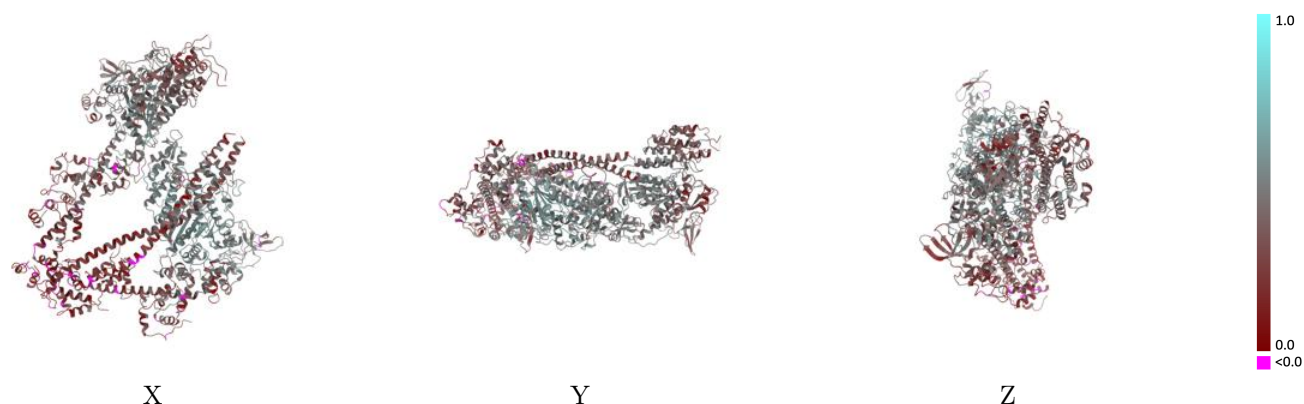
This section contains information regarding the fit between EMDB map EMD-56106 and PDB model 9TPJ. Per-residue inclusion information can be found in section [3](#) on page [7](#).

9.1 Map-model overlay [i](#)



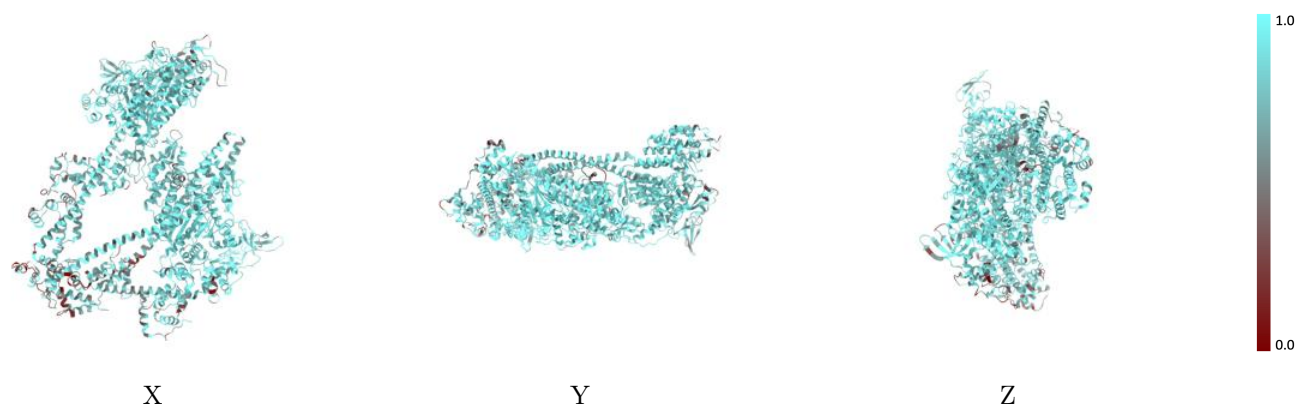
The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.126 at 50% transparency in yellow overlaid with a ribbon representation of the model coloured in blue. These images allow for the visual assessment of the quality of fit between the atomic model and the map.

9.2 Q-score mapped to coordinate model [i](#)



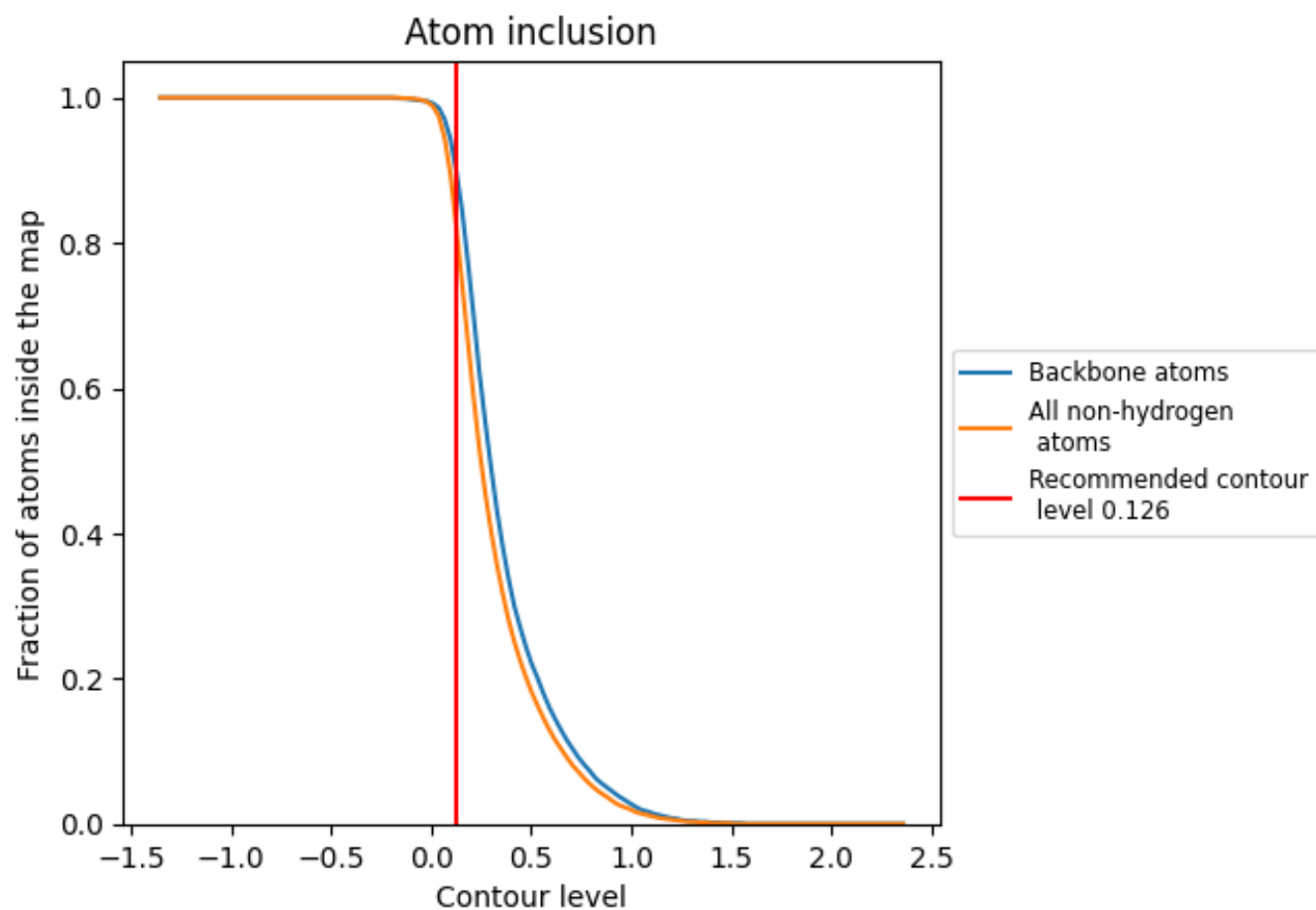
The images above show the model with each residue coloured according its Q-score. This shows their resolvability in the map with higher Q-score values reflecting better resolvability. Please note: Q-score is calculating the resolvability of atoms, and thus high values are only expected at resolutions at which atoms can be resolved. Low Q-score values may therefore be expected for many entries.

9.3 Atom inclusion mapped to coordinate model [i](#)



The images above show the model with each residue coloured according to its atom inclusion. This shows to what extent they are inside the map at the recommended contour level (0.126).

9.4 Atom inclusion [i](#)



At the recommended contour level, 90% of all backbone atoms, 82% of all non-hydrogen atoms, are inside the map.

9.5 Map-model fit summary ⓘ

The table lists the average atom inclusion at the recommended contour level (0.126) and Q-score for the entire model and for each chain.

Chain	Atom inclusion	Q-score
All	<div><div></div>0.8210</div>	<div><div></div>0.3850</div>
A	<div><div></div>0.8800</div>	<div><div></div>0.4600</div>
B	<div><div></div>0.8420</div>	<div><div></div>0.3940</div>
C	<div><div></div>0.7370</div>	<div><div></div>0.2890</div>
D	<div><div></div>0.7760</div>	<div><div></div>0.3150</div>
E	<div><div></div>0.6660</div>	<div><div></div>0.1930</div>
F	<div><div></div>0.6040</div>	<div><div></div>0.1990</div>

1.0

0.0

<0.0