



## wwPDB EM Validation Summary Report ⓘ

Nov 19, 2022 – 03:45 pm GMT

PDB ID : 5NP1  
EMDB ID : EMD-3672  
Title : Open protomer of human ATM (Ataxia telangiectasia mutated)  
Authors : Baretic, D.; Pollard, H.K.; Fisher, D.I.; Johnson, C.M.; Santhanam, B.; Truman, C.M.; Kouba, T.; Fersht, A.R.; Phillips, C.; Williams, R.L.  
Deposited on : 2017-04-13  
Resolution : 5.70 Å(reported)

This is a wwPDB EM Validation Summary Report for a publicly released PDB entry.

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

A user guide is available at

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/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.dev43  
MolProbity : 4.02b-467  
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)  
MapQ : 1.9.9  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.31.2

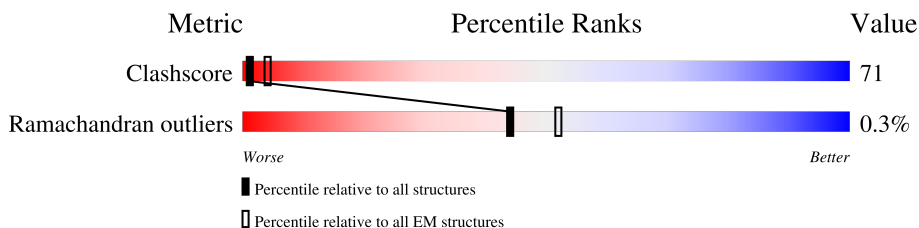
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*ELECTRON MICROSCOPY*

The reported resolution of this entry is 5.70 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)
Clashscore	158937	4297
Ramachandran outliers	154571	4023

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  $\geq 3$ , 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	3066	 28% 51% . 20%

## 2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 12201 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 Serine-protein kinase ATM.

Mol	Chain	Residues	Atoms			AltConf	Trace	
			Total	C	N			O
1	A	2460	12201	7281	2460	2460	0	0

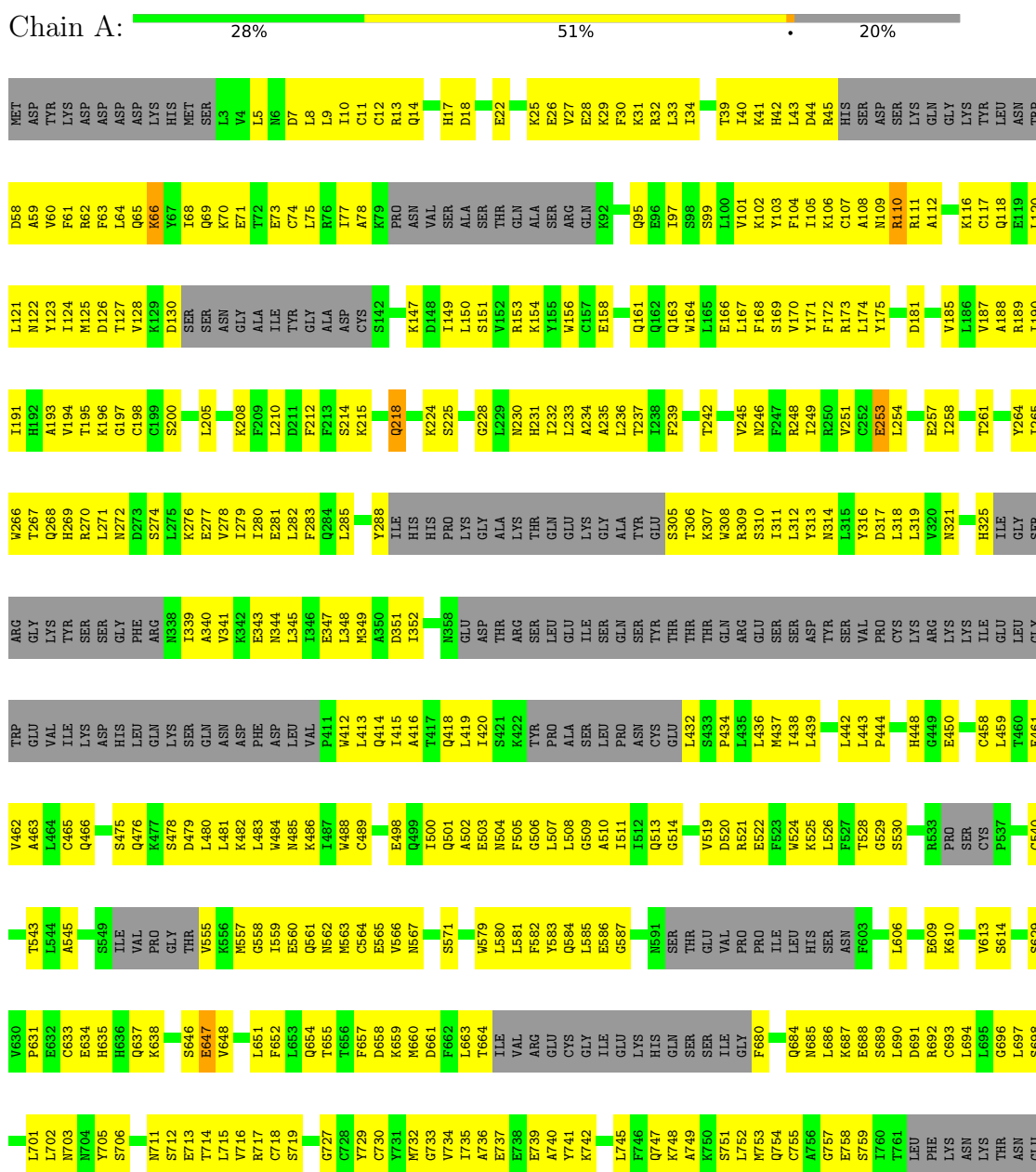
There are 10 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	-9	MET	-	initiating methionine	UNP Q13315
A	-8	ASP	-	expression tag	UNP Q13315
A	-7	TYR	-	expression tag	UNP Q13315
A	-6	LYS	-	expression tag	UNP Q13315
A	-5	ASP	-	expression tag	UNP Q13315
A	-4	ASP	-	expression tag	UNP Q13315
A	-3	ASP	-	expression tag	UNP Q13315
A	-2	ASP	-	expression tag	UNP Q13315
A	-1	LYS	-	expression tag	UNP Q13315
A	0	HIS	-	expression tag	UNP Q13315

### 3 Residue-property plots

These plots are drawn for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of the various outlier classes displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry and atom inclusion in map density. Residues are color-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. A red diamond above a residue indicates a poor fit to the EM map for this residue (all-atom inclusion < 40%). Stretches of 2 or more consecutive residues without any outlier are shown as a green connector. Residues present in the sample, but not in the model, are shown in grey.

#### • Molecule 1: Serine-protein kinase ATM



L1715	L1716	Y1717	Y1718	L1719	M1720	R1633	L1721	L1722	Y1723	L1724	D1725	L1726	Y1727	K1728	S1731	A1732	L1733	A1734	Y1735	L1736	L1737	K1738	M1739	L1740	L1741	A1742	T1743	K1744	T1745	G1746	H1747	S1748	Y1749	M1750	E1751	L1752	Y1753	K1754	M1755	T1756	T1757	D1758	A1762	Q1765	R1768	T1769	S1770	ARG	LYS	PHE	LEU	GLU																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																					
K1625	D1630	I1631	M1632	R1633	L1634	S1635	Q1636	D1637	Q1640	G1642	I1643	M1644	V1645	K1646	V1647	V1648	A1658	I1659	L1660	H1661	L1662	G1663	E1664	K1665	E1666	V1667	L1668	L1669	G1676	E1677	V1678	G1679	P1680	L1681	D1682	I1686	A1687	I1688	S1695	L1702	F1703	E1704	LYS	K1706	PHE	L1708	D1616	L1617	R1618	R1619	L1625	D1630	D1637	D1644	D1651	D1652	D1653	D1654	D1655	D1656	D1657	D1658	D1659	D1660	D1661	D1662	D1663	D1664	D1665	D1666	D1667	D1668	D1669	D1670	D1671	D1672	D1673	D1674	D1675	D1676	D1677	D1678	D1679	D1680	D1681	D1682	D1683	D1684	D1685	D1686	D1687	D1688	D1689	D1690	D1691	D1692	D1693	D1694	D1695	D1696	D1697	D1698	D1699	D1700	D1701	D1702	D1703	D1704	D1705	D1706	D1707	D1708	D1709	D1710	D1711	D1712	D1713	D1714	D1715	D1716	D1717	D1718	D1719	D1720	D1721	D1722	D1723	D1724	D1725	D1726	D1727	D1728	D1729	D1730	D1731	D1732	D1733	D1734	D1735	D1736	D1737	D1738	D1739	D1740	D1741	D1742	D1743	D1744	D1745	D1746	D1747	D1748	D1749	D1750	D1751	D1752	D1753	D1754	D1755	D1756	D1757	D1758	D1759	D1760	D1761	D1762	D1763	D1764	D1765	D1766	D1767	D1768	D1769	D1770	D1771	D1772	D1773	D1774	D1775	D1776	D1777	D1778	D1779	D1780	D1781	D1782	D1783	D1784	D1785	D1786	D1787	D1788	D1789	D1790	D1791	D1792	D1793	D1794	D1795	D1796	D1797	D1798	D1799	D1800	D1801	D1802	D1803	D1804	D1805	D1806	D1807	D1808	D1809	D1810	D1811	D1812	D1813	D1814	D1815	D1816	D1817	D1818	D1819	D1820	D1821	D1822	D1823	D1824	D1825	D1826	D1827	D1828	D1829	D1830	D1831	D1832	D1833	D1834	D1835	D1836	D1837	D1838	D1839	D1840	D1841	D1842	D1843	D1844	D1845	D1846	D1847	D1848	D1849	D1850	D1851	D1852	D1853	D1854	D1855	D1856	D1857	D1858	D1859	D1860	D1861	D1862	D1863	D1864	D1865	D1866	D1867	D1868	D1869	D1870	D1871	D1872	D1873	D1874	D1875	D1876	D1877	D1878	D1879	D1880	D1881	D1882	D1883	D1884	D1885	D1886	D1887	D1888	D1889	D1890	D1891	D1892	D1893	D1894	D1895	D1896	D1897	D1898	D1899	D1900	D1901	D1902	D1903	D1904	D1905	D1906	D1907	D1908	D1909	D1910	D1911	D1912	D1913	D1914	D1915	D1916	D1917	D1918	D1919	D1920	D1921	D1922	D1923	D1924	D1925	D1926	D1927	D1928	D1929	D1930	D1931	D1932	D1933	D1934	D1935	D1936	D1937	D1938	D1939	D1940	D1941	D1942	D1943	D1944	D1945	D1946	D1947	D1948	D1949	D1950	D1951	D1952	D1953	D1954	D1955	D1956	D1957	D1958	D1959	D1960	D1961	D1962	D1963	D1964	D1965	D1966	D1967	D1968	D1969	D1970	D1971	D1972	D1973	D1974	D1975	D1976	D1977	D1978	D1979	D1980	D1981	D1982	D1983	D1984	D1985	D1986	D1987	D1988	D1989	D1990	D1991	D1992	D1993	D1994	D1995	D1996	D1997	D1998	D1999	D2000	D2001	D2002	D2003	D2004	D2005	D2006	D2007	D2008	D2009	D2010	D2011	D2012	D2013	D2014	D2015	D2016	D2017	D2018	D2019	D2020	D2021	D2022	D2023	D2024	D2025	D2026	D2027	D2028	D2029	D2030	D2031	D2032	D2033	D2034	D2035	D2036	D2037	D2038	D2039	D2040	D2041	D2042	D2043	D2044	D2045	D2046	D2047	D2048	D2049	D2050	D2051	D2052	D2053	D2054	D2055	D2056	D2057	D2058	D2059	D2060	D2061	D2062	D2063	D2064	D2065	D2066	D2067	D2068	D2069	D2070	D2071	D2072	D2073	D2074	D2075	D2076	D2077	D2078	D2079	D2080	D2081	D2082	D2083	D2084	D2085	D2086	D2087	D2088	D2089	D2090	D2091	D2092	D2093	D2094	D2095	D2096	D2097	D2098	D2099	D2100	D2101	D2102	D2103	D2104	D2105	D2106	D2107	D2108	D2109	D2110	D2111	D2112	D2113	D2114	D2115	D2116	D2117	D2118	D2119	D2120	D2121	D2122	D2123	D2124	D2125	D2126	D2127	D2128	D2129	D2130	D2131	D2132	D2133	D2134	D2135	D2136	D2137	D2138	D2139	D2140	D2141	D2142	D2143	D2144	D2145	D2146	D2147	D2148	D2149	D2150	D2151	D2152	D2153	D2154	D2155	D2156	D2157	D2158	D2159	D2160	D2161	D2162	D2163	D2164	D2165	D2166	D2167	D2168	D2169	D2170	D2171	D2172	D2173	D2174	D2175	D2176	D2177	D2178	D2179	D2180	D2181	D2182	D2183	D2184	D2185	D2186	D2187	D2188	D2189	D2190	D2191	D2192	D2193	D2194	D2195	D2196	D2197	D2198	D2199	D2200	D2201	D2202	D2203	D2204	D2205	D2206	D2207	D2208	D2209	D2210	D2211	D2212	D2213	D2214	D2215	D2216	D2217	D2218	D2219	D2220	D2221	D2222	D2223	D2224	D2225	D2226	D2227	D2228	D2229	D2230	D2231	D2232	D2233	D2234	D2235	D2236	D2237	D2238	D2239	D2240	D2241	D2242	D2243	D2244	D2245	D2246	D2247	D2248	D2249	D2250	D2251	D2252	D2253	D2254	D2255	D2256	D2257	D2258	D2259	D2260	D2261	D2262	D2263	D2264	D2265	D2266	D2267	D2268	D2269	D2270	D2271	D2272	D2273	D2274	D2275	D2276	D2277	D2278	D2279	D2280	D2281	D2282	D2283	D2284	D2285	D2286	D2287	D2288	D2289	D2290	D2291	D2292	D2293	D2294	D2295	D2296	D2297	D2298	D2299	D2300	D2301	D2302	D2303	D2304	D2305	D2306	D2307	D2308	D2309	D2310	D2311	D2312	D2313	D2314	D2315	D2316	D2317	D2318	D2319	D2320	D2321	D2322	D2323	D2324	D2325	D2326	D2327	D2328	D2329	D2330	D2331	D2332	D2333	D2334	D2335	D2336	D2337	D2338	D2339	D2340	D2341	D2342	D2343	D2344	D2345	D2346	D2347	D2348	D2349	D2350	D2351	D2352	D2353	D2354	D2355	D2356	D2357	D2358	D2359	D2360	D2361	D2362	D2363	D2364	D2365	D2366	D2367	D2368	D2369	D2370	D2371	D2372	D2373	D2374	D2375	D2376	D2377	D2378	D2379	D2380	D2381	D2382	D2383	D2384	D2385	D2386	D2387	D2388	D2389	D2390	D2391	D2392	D2393	D2394	D2395	D2396	D2397	D2398	D2399	D2400	D2401	D2402	D2403	D2404	D2405	D2406	D2407	D2408	D2409	D2410	D2411	D2412	D2413	D2414	D2415	D2416	D2417	D2418	D2419	D2420	D2421	D2422	D2423	D2424	D2425	D2426	D2427	D2428	D2429	D2430	D2431	D2432	D2433	D2434	D2435	D2436	D2437	D2438	D2439	D2440	D2441	D2442	D2443	D2444	D2445	D2446	D2447	D2448	D2449	D2450	D2451	D2452	D2453	D2454	D2455	D2456	D2457	D2458	D2459	D2460	D2461	D2462	D2463	D2464	D2465	D2466	D2467	D2468	D2469	D2470	D2471	D2472	D2473	D2474	D2475	D2476	D2477	D2478	D2479	D2480	D2481	D2482	D2483	D2484	D2485	D2486	D2487	D2488	D2489	D2490	D2491	D2492	D2493	D2494	D2495	D2496	D2497	D2498	D2499	D2500	D2501	D2502	D2503	D2504	D2505	D2506	D2507	D2508	D2509	D2510	D2511	D2512	D2513	D2514	D2515	D2516	D2517	D2518	D2519	D2520	D2521	D2522	D2523	D2524	D2525	D2526	D2527	D2528	D2529	D2530	D2531	D2532	D2533	D2534	D2535	D2536	D2537	D2538	D2539	D2540	D2541	D2542	D2543	D2544	D2545	D2546	D2547	D2548	D2549	D2550	D2551	D2552	D2553	D2554	D2555	D2556	D2557	D2558	D2559	D2560	D2561	D2562	D2563	D2564	D2565	D2566	D2567	D2568	D2569	D2570	D2571	D2572	D2573	D2574	D2575	D2576	D2577	D2578	D2579	D2580	D2581	D2582	D2583	D2584	D2585	D2586	D2587	D2588	D2589	D2590	D2591	D2592	D2593	D2594	D2595	D2596	D2597	D2598	D2599	D2600	D2601	D2602	D2603	D2604	D2605	D2606	D2607	D2608	D2609	D2610	D2611	D2612	D2613	D2614	D2615	D2616	D2617	D2618	D2619	D2620	D2621	D2622	D2623	D2624	D2625	D2626	D2627	D2628	D2629	D2630	D2631	D2632	D2633	D2634	D2635	D2636	D2637	D2638	D2639	D2640	D2641	D2642	D2643	D2644	D2645	D2646	D2647	D2648	D2649	D2650	D2651	D2652	D2653	D2654	D2655	D2656	D2657	D2658	D2659	D2660	D2661	D2662	D2663	D2664	D2665	D2666	D2667	D2668	D2669	D2670	D2671	D2672	D2673	D2674	D2675	D2676	D2677	D2678	D2679	D2680	D2681	D2682	D2683	D2684	D2685	D2686	D2687	D2688	D2689	D2690	D2691	D2692	D2693	D2694	D2695	D2696	D2697	D2698	D2699	D2700	D2701	D2702	D2703	D2704	D2705	D2706	D2707	D2708	D2709	D2710	D2711	D2712	D2713	D2714	D2715	D2716	D2717	D2718	D2719	D2720	D2721	D2722	D2723	D2724	D2725	D2726	D2727	D2728	D2729	D2730	D2731	D2732	D2733	D2734	D2735	D2736	D2737	D2738	D2739	D2740	D2741	D2742	D2743	D2744	D2745	D2746	D2747	D2748	D2749	D2750	D2751	D2752	D2753	D2754	D2755	D2756	D2757	D2758	D2759	D2760	D2761	D2762	D2763	D2764	D2765	D2766	D2767	D2768	D2769	D2770	D2771	D2772	D2773	D2774	D2775	D2776	D2777	D2778	D2779	D2780	D2781	D2782	D2783	D2784	D2785	D2786	D2787	D2788	D2789	D2790	D2791	D2792	D2793	D2794	D2795	D2796	D2797	D2798	D2799	D2800	D2801	D2802	D2803	D2804	D2805	D2806	D2807	D2808	D2809	D2810	D2811	D2812	D2813	D2814	D2815	D2816	D2817	D2818	D2819	D2820	D2821	D2822	D2823	D2824	D2825	D2826	D2827	D2828	D2829	D2830	D2831	D2832	D2833	D2834	D2835	D2836	D2837	D2838	D2839	D2840	D2841	D2842	D2843	D2844	D2845	D2846	D2847	D2848	D2849	D2850	D2851	D2852	D2853	D2854	D2855	D2856	D2857	D2858	D2859	D2860	D2861	D2862	D2863	D2864	D2865	D2866	D2867	D2868	D2869	D2870	D2871	D2872	D2873	D2874	D2875	D2876	D2877	D2878	D2879	D2880	D2881	D2882	D2883	D2884	D2885	D2886	D2887	D2888	D2889	D2890	D2891	D2892	D2893	D2894	D2895	D2896	D2897	D2898	D2899	D2900	D2901

T2737	L2647	D2507	A2321	D2249	I2179	S2116	LEU	GLU	F1928	M1860	PHE
L2738	P2648	G2508	S2322	I2250	G2180	L2161	GLU	LYS	N1929	L1861	ASP
L2739	A2649	A2386	C2324	L2251	E2181	L2152	GLU	SER	D1930	L1862	THR
Q2740	P2512	F2387	A2324	T2252	L2182	L2153	ALA	THR	A1931	S1863	GLY
T2743	T2513	L2388	ALA	K2253	E2183	VAL	PRO	ILE	F1932	T1864	ASN
E2744	E2449	S2389	ASN	H2254	S2184	GLU	ASN	PRO	W1933	H1865	PRO
T2745	L2450	L2390	ASN	L2255	I2185	GLY	SER	SER	E1936	H1866	PHE
R2746	A2451	A2391	P2328	V2256	I2186	THR	THR	G1987	T1987	Q1867	GLU
R2747	L2452	R2392	K2331	E2257	E2187	THR	THR	Q1868	G1988	Q1868	GLY
R2748	R2453	F2393	L2332	L2258	S2123	S2123	THR	F1869	L1939	G1868	GLY
K2749	A2454	S2394	L2332	S2259	H2125	H2125	ARG	F1870	E1940	F1869	ASP
K2749	L2455	D2395	L2333	I2260	R2191	R2191	GLN	S1871	A1941	F1870	ASP
S2761	K2456	T2396	Y2334	L2261	SER	SER	GLY	S1872	V1942	T1871	ILE
R2762	E2457	Q2397	T2335	A2262	VAL	VAL	ILE	C1873	K1943	C1873	ASN
R2763	D2458	Y2398	C2336	R2263	T2194	T2194	ILE	L1874	V1944	L1874	LEU
S2764	K2460	Q2399	E2337	T2264	H2130	H2130	ILE	R1875	A1945	R1875	TRP
G2765	R2461	R2400	L2338	F2265	A2131	A2131	ALA	H1876	E2007	E2007	ILE
V2766	F2462	E2402	R2339	K2266	L2132	L2132	ALA	H1877	Q1946	Q1946	ILE
E2768	L2463	N2403	V2340	R2267	Q2133	Q2133	GLN	S1878	A1949	A1949	GLN
V2774	K2465	Y2404	C2341	R2273	S2134	S2134	ASN	Q1879	A1950	A1950	ASN
P2775	R2466	M2405	G2342	A2274	L2135	L2135	LEU	T1880	H1951	H1951	LEU
A2776	V2467	K2406	N2343	I2275	R2136	R2136	GLY	S1881	F1952	F1952	GLY
G2777	E2468	S2408	W2344	F2276	L2137	L2137	LEU	R1882	T1953	T1953	LEU
E2778	N2469	E2409	E2347	Q2277	C2074	C2074	LEU	S1883	A1954	A1954	LEU
L2698	Y2470	E2410	E2348	Q2280	H2075	H2075	LEU	T1884	L1955	L1955	LEU
L2699	T2471	E2411	C2349	L2077	L2077	L2077	LEU	T1885	L1956	L1956	LEU
L2700	R2472	N2412	N2352	S2078	L2078	L2078	LEU	E1822	Y1957	Y1957	LEU
L2701	C2473	K2413	P2353	S2079	S2079	S2079	LEU	L1823	A1958	A1958	LEU
L2702	L2474	GLN	P2354	F2278	Y2080	Y2080	LEU	L1824	E1959	E1959	LEU
D2703	S2475	ALA	A2354	Q2279	L2081	L2081	LEU	Q1825	Y1961	Y1961	LEU
D2704	R2476	LEU	A2355	K2279	K2082	K2082	LEU	L1826	A1962	A1962	LEU
P2705	L2480	LEU	V2356	Q2281	D2085	D2085	GLY	L1827	D1963	D1963	GLY
G2706	H2481	LEU	M2357	Y2281	Y2086	Y2086	LEU	K1828	K1964	K1964	GLY
S2707	W2482	ARG	M2358	Z2281	GLU	GLU	ASN	E1829	K1965	K1965	LEU
E2711	W2483	GLU	T2359	Q2297	R2151	R2151	LEU	M1830	S1966	S1966	LEU
E2712	F2484	GLU	Y2360	V2298	V2152	V2152	LYS	C1831	M1967	M1967	LEU
D2695	F2485	VAL	L2361	F2299	K2153	K2153	ASP	E1832	D1968	D1968	GLN
D2696	R2486	VAL	E2362	W2300	E2221	E2221	ASP	V1833	D1969	D1969	PRO
A2626	L2487	GLY	K2363	A2301	V2155	V2155	TRP	K1904	Q1970	Q1970	ILE
Y2627	C2488	LEU	A2364	K2302	E2156	E2156	CYS	T1835	E1971	E1971	THR
L2628	S2489	LEU	V2365	K2303	E2157	E2157	PRO	T1836	K1972	K1972	ARG
L2629	L2490	ARG	E2366	E2304	L2095	L2095	LEU	D1836	R1907	R1907	LEU
L2630	W2491	GLU	V2367	Q2305	L2096	L2096	ARG	V1841	T1908	T1908	ARG
A2631	L2492	HIS	L2368	S2306	E2096	E2096	THR	L1842	M1909	M1909	THR
D2634	N2494	ILE	G2369	L2307	E2097	E2097	TYR	P1843	L1910	L1910	TYR
ALA	N2495	THR	T2370	A2308	V2166	V2166	GLU	A1976	PHE	PHE	GLU
THR	S2495	THR	TVR	L2309	Y2167	Y2167	HIS	GLU	A1911	A1911	GLU
GLN	S2498	ASN	ASP	L2310	S2168	S2168	GLU	GLU	V1912	V1912	GLU
GLN	E2499	ASN	GLY	L2311	L2169	L2169	ALA	GLY	V1913	V1913	GLY
GLN	E2499	ASN	GLY	L2312	L2170	L2170	ALA	SER	D1846	D1846	GLY
GLN	E2499	ASN	GLY	L2313	L2171	L2171	ALA	SER	H1847	H1847	GLY
GLN	E2499	ASN	GLY	L2314	L2172	L2172	ALA	SER	D1848	D1848	GLY
GLN	E2499	ASN	GLY	L2315	L2173	L2173	ALA	SER	L1850	L1850	GLY
GLN	E2499	ASN	GLY	L2316	L2174	L2174	ALA	SER	R1917	R1917	GLY
GLN	E2499	ASN	GLY	L2317	L2175	L2175	ALA	SER	M1916	M1916	GLN
GLN	E2499	ASN	GLY	L2318	L2176	L2176	ALA	SER	GLY	GLY	GLY
GLN	E2499	ASN	GLY	L2319	L2177	L2177	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2320	L2178	L2178	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2321	L2179	L2179	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2322	L2180	L2180	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2323	L2181	L2181	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2324	L2182	L2182	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2325	L2183	L2183	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2326	L2184	L2184	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2327	L2185	L2185	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2328	L2186	L2186	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2329	L2187	L2187	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2330	L2188	L2188	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2331	L2189	L2189	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2332	L2190	L2190	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2333	L2191	L2191	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2334	L2192	L2192	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2335	L2193	L2193	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2336	L2194	L2194	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2337	L2195	L2195	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2338	L2196	L2196	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2339	L2197	L2197	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2340	L2198	L2198	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2341	L2199	L2199	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2342	L2200	L2200	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2343	E2201	E2201	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2344	Y2202	Y2202	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2345	K2203	K2203	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2346	L2204	L2204	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2347	W2205	W2205	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2348	Q2206	Q2206	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2349	K2207	K2207	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2350	H2208	H2208	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2351	H2209	H2209	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2352	Y2079	Y2079	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2353	L2081	L2081	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2354	K2082	K2082	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2355	D2085	D2085	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2356	Y2086	Y2086	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2357	GLU	GLU	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2358	LEU	LEU	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2359	LYS	LYS	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2360	ASP	ASP	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2361	TRP	TRP	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2362	PRO	PRO	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2363	ILE	ILE	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2364	CYS	CYS	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2365	PRO	PRO	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2366	ARG	ARG	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2367	THR	THR	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2368	GLN	GLN	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2369	ASN	ASN	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2370	THR	THR	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2371	ASP	ASP	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2372	GLY	GLY	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2373	GLY	GLY	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2374	GLY	GLY	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2375	GLY	GLY	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2376	GLY	GLY	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2377	GLY	GLY	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2378	GLY	GLY	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2379	GLY	GLY	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2380	GLY	GLY	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2381	GLY	GLY	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2382	GLY	GLY	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2383	GLY	GLY	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2384	GLY	GLY	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2385	GLY	GLY	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2386	GLY	GLY	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2387	GLY	GLY	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2388	GLY	GLY	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E2499	ASN	GLY	L2389	GLY	GLY	ALA	SER	THR	THR	THR
GLN	E										

N3033	GLN
L3034	GLN
L3035	ARG
I3036	PRD
Q3037	GLU
Q3038	ASP
A3039	GLU
I3040	THR
D3041	GLU
P3042	LEU
K3043	HIS
S3046	PRD
R3047	THR
L3048	LEU
F3049	ASN
W3052	ALA
K3053	ASP
A3054	GLN
W3055	GLU
V3056	CYS
V2819	LYS
F2820	ARG
M2821	ASN
D2822	LEU
V2823	SER
C2824	ASP
Q2825	ASP
M2826	ASP
F2827	ASP
R2832	ASP
V2833	ASP
F2834	ASP
C2835	ASP
F2839	ASP
L2840	ASP
D2841	ASP
P2842	GLN
A2843	GLU
L2844	CYS
W2845	LYS
F2846	ARG
E2847	ASN
K2848	LEU
R2849	SER
L2850	ASP
A2851	K2932
Y2852	T2934
T2853	M2935
R2854	E2936
S2855	F2937
V2856	N3003
A2857	K3004
T2858	V3005
S2859	A3006
S2860	E3007
T2861	R3008
V2862	V3009
G2863	L3010
L2866	M3011
G2867	R3012
H2872	L3013
V2873	Q3014
Q2874	E3015
N2875	K3016
L2876	L3017
L2877	K3018
L2878	G3019
M2879	V3020
E2880	T3024
A2883	V3025
F2884	L3026
L2885	S3027
V2886	V3028
A2893	G3029
L2917	G3030
L2970	Q3031
L2970	V3032
F2894	D2999
E2895	Q3000
Q2896	S3001
I2899	F3002
L2810	N3003
T2911	K3004
R2912	V3005
D2913	A3006
I2914	E3007
V2915	R3008
D2916	V3009
G2917	L3010
T2921	M3011
G2922	R3012
V2923	L3013
E2924	Q3014
G2925	E3015
V2926	K3016
F2927	L3017
R2928	K3018
R2929	G3019
C2930	V3020
C2931	T3024
E2932	V3025
K2933	L3026
T2934	S3027
M2935	V3028
E2936	G3029
F2937	G3030
N2940	Q3031
S2941	V3032
T2942	F2956
E2943	L2957
T2944	F2958
L2945	D2959
L2946	W2960
T2947	T2961
I2948	M2962
V2949	M2963
E2950	A2967
E2950	L2970
V2951	L2970
L2952	L2970
L2953	L2970
N2956	L2970
L2957	L2970
F2958	L2970
D2959	L2970
W2960	L2970
T2961	L2970
M2962	L2970
M2963	L2970
A2967	L2970
L2970	L2970

## 4 Experimental information

Property	Value	Source
EM reconstruction method	SINGLE PARTICLE	Depositor
Imposed symmetry	POINT, C1	Depositor
Number of particles used	60556	Depositor
Resolution determination method	FSC 0.143 CUT-OFF	Depositor
CTF correction method	PHASE FLIPPING ONLY	Depositor
Microscope	FEI TITAN KRIOS	Depositor
Voltage (kV)	300	Depositor
Electron dose ( $e^-/\text{\AA}^2$ )	2.1	Depositor
Minimum defocus (nm)	2500	Depositor
Maximum defocus (nm)	4000	Depositor
Magnification	35714	Depositor
Image detector	GATAN K2 SUMMIT (4k x 4k)	Depositor
Maximum map value	0.137	Depositor
Minimum map value	-0.043	Depositor
Average map value	-0.000	Depositor
Map value standard deviation	0.004	Depositor
Recommended contour level	0.026	Depositor
Map size ( $\text{\AA}$ )	428.99997, 428.99997, 428.99997	wwPDB
Map dimensions	300, 300, 300	wwPDB
Map angles ( $^\circ$ )	90.0, 90.0, 90.0	wwPDB
Pixel spacing ( $\text{\AA}$ )	1.43, 1.43, 1.43	Depositor



## 5 Model quality [i](#)

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

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	0.53	2/12155 (0.0%)	0.66	3/16884 (0.0%)

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

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	A	0	78

All (2) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	218	GLN	CA-C	-5.64	1.38	1.52
1	A	647	GLU	CA-C	-5.42	1.38	1.52

All (3) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	2765	GLY	N-CA-C	6.78	130.04	113.10
1	A	1925	GLY	N-CA-C	-6.52	96.80	113.10
1	A	1924	SER	C-N-CA	-5.00	111.80	122.30

There are no chirality outliers.

5 of 78 planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	110	ARG	Peptide
1	A	111	ARG	Peptide
1	A	181	ASP	Peptide
1	A	248	ARG	Peptide
1	A	66	LYS	Peptide

## 5.2 Too-close contacts [i](#)

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	12201	0	5285	1241	0
All	All	12201	0	5285	1241	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 71.

The worst 5 of 1241 close contacts within the same asymmetric unit are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1480:PRO:HA	1:A:1484:MET:H	1.16	1.10
1:A:1606:LEU:O	1:A:1608:LEU:N	1.88	1.07
1:A:2714:GLN:HA	1:A:2768:GLU:HA	1.40	1.01
1:A:2388:LEU:O	1:A:2392:ARG:N	1.94	1.00
1:A:1712:PHE:O	1:A:1715:LEU:N	1.96	0.99

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	2368/3066 (77%)	2142 (90%)	218 (9%)	8 (0%)	41 76

5 of 8 Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	2776	ILE
1	A	1607	PRO
1	A	2645	ILE
1	A	1367	ASP
1	A	1688	ILE

### 5.3.2 Protein sidechains [i](#)

There are no protein residues with a non-rotameric sidechain to report in this entry.

### 5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

### 5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

### 5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

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

There are no such residues in this entry.

### 5.8 Polymer linkage issues [i](#)

The following chains have linkage breaks:

Mol	Chain	Number of breaks
1	A	4

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
1	A	128:VAL	C	129:LYS	N	3.85
1	A	1200:THR	C	1201:PHE	N	3.19
1	A	163:GLN	C	164:TRP	N	3.09
1	A	1394:SER	C	1395:ASN	N	3.08

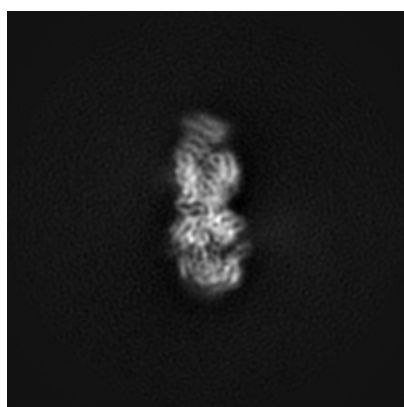
## 6 Map visualisation [i](#)

This section contains visualisations of the EMDB entry EMD-3672. These allow visual inspection of the internal detail of the map and identification of artifacts.

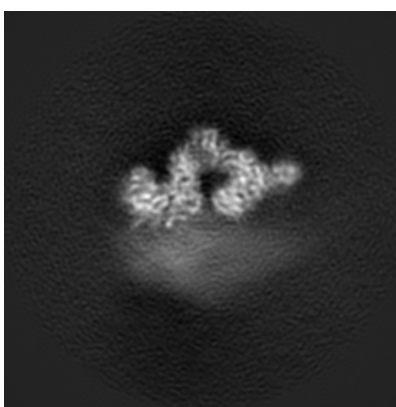
No raw map or half-maps were deposited for this entry and therefore no images, graphs, etc. pertaining to the raw map can be shown.

### 6.1 Orthogonal projections [i](#)

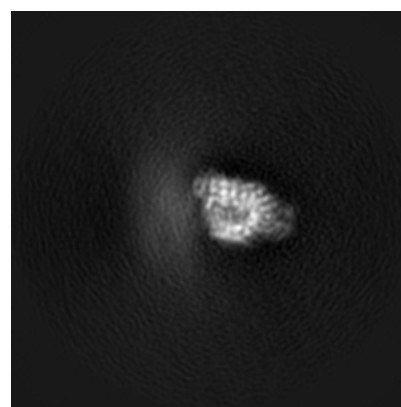
#### 6.1.1 Primary map



X



Y

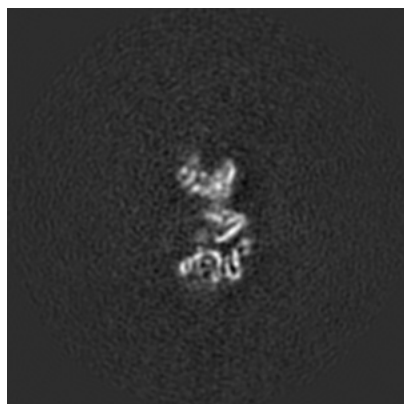


Z

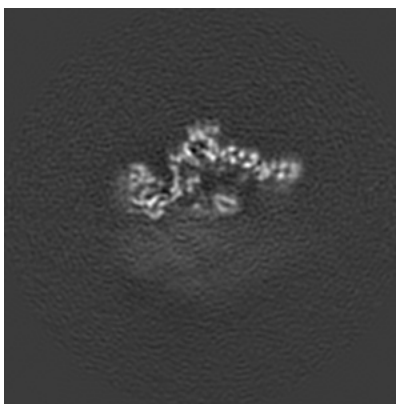
The images above show the map projected in three orthogonal directions.

### 6.2 Central slices [i](#)

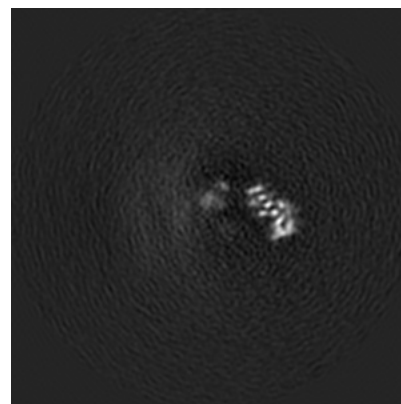
#### 6.2.1 Primary map



X Index: 150



Y Index: 150

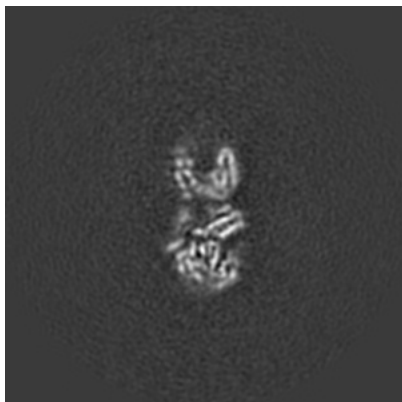


Z Index: 150

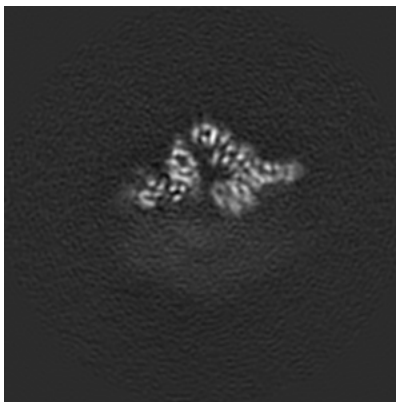
The images above show central slices of the map in three orthogonal directions.

## 6.3 Largest variance slices [i](#)

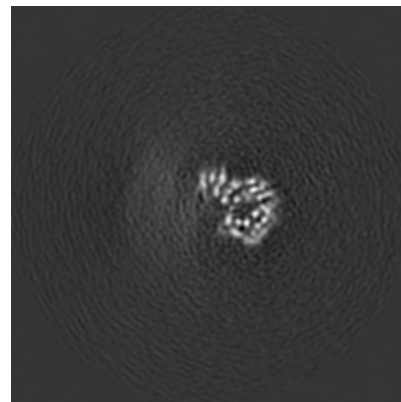
### 6.3.1 Primary map



X Index: 159



Y Index: 138



Z Index: 134

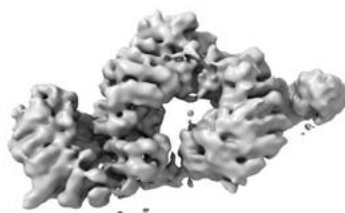
The images above show the largest variance slices of the map in three orthogonal directions.

## 6.4 Orthogonal surface views [i](#)

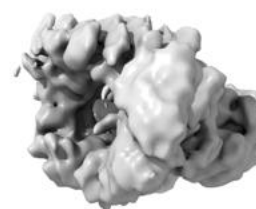
### 6.4.1 Primary map



X



Y



Z

The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.026. These images, in conjunction with the slice images, may facilitate assessment of whether an appropriate contour level has been provided.

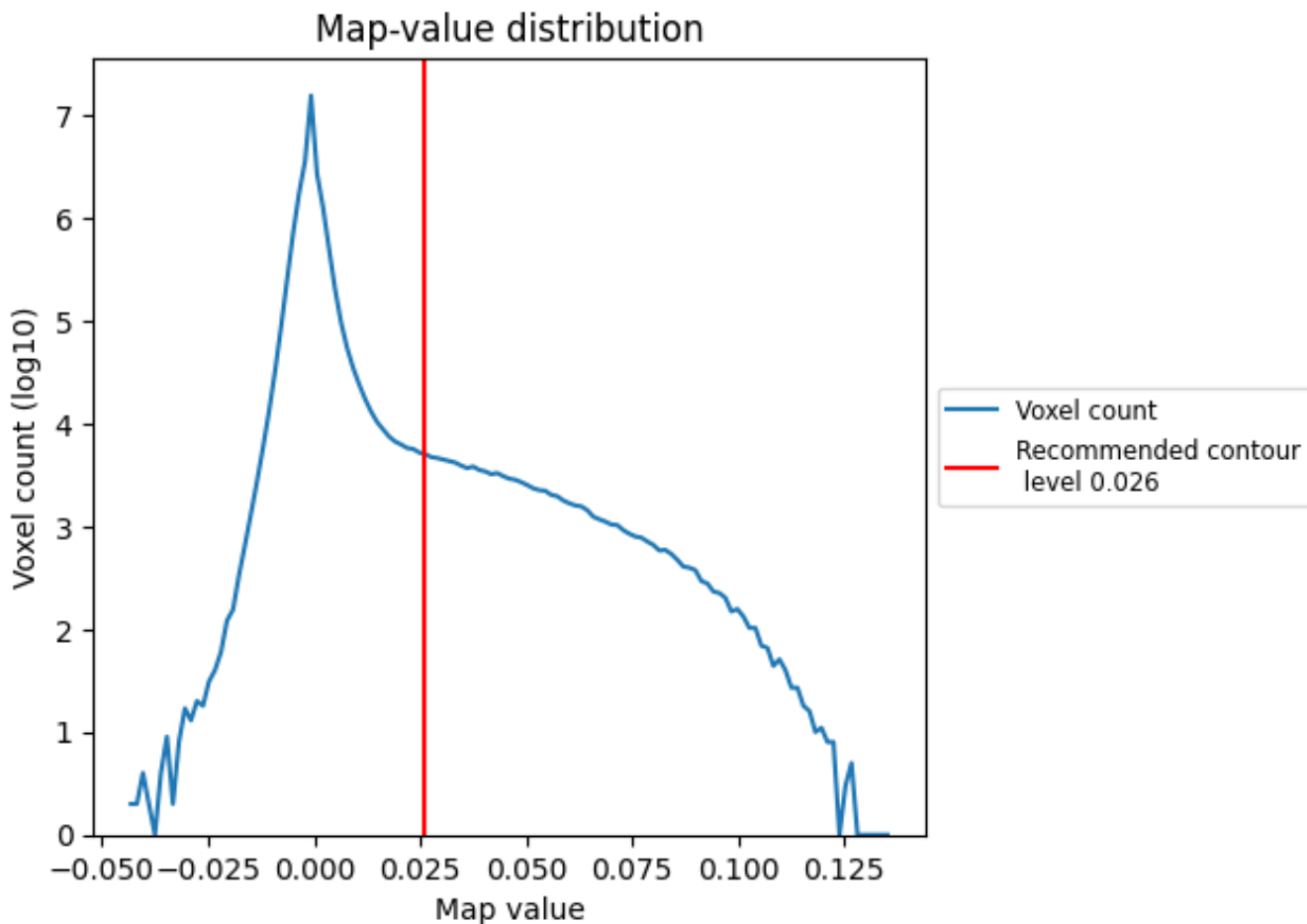
## 6.5 Mask visualisation

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.

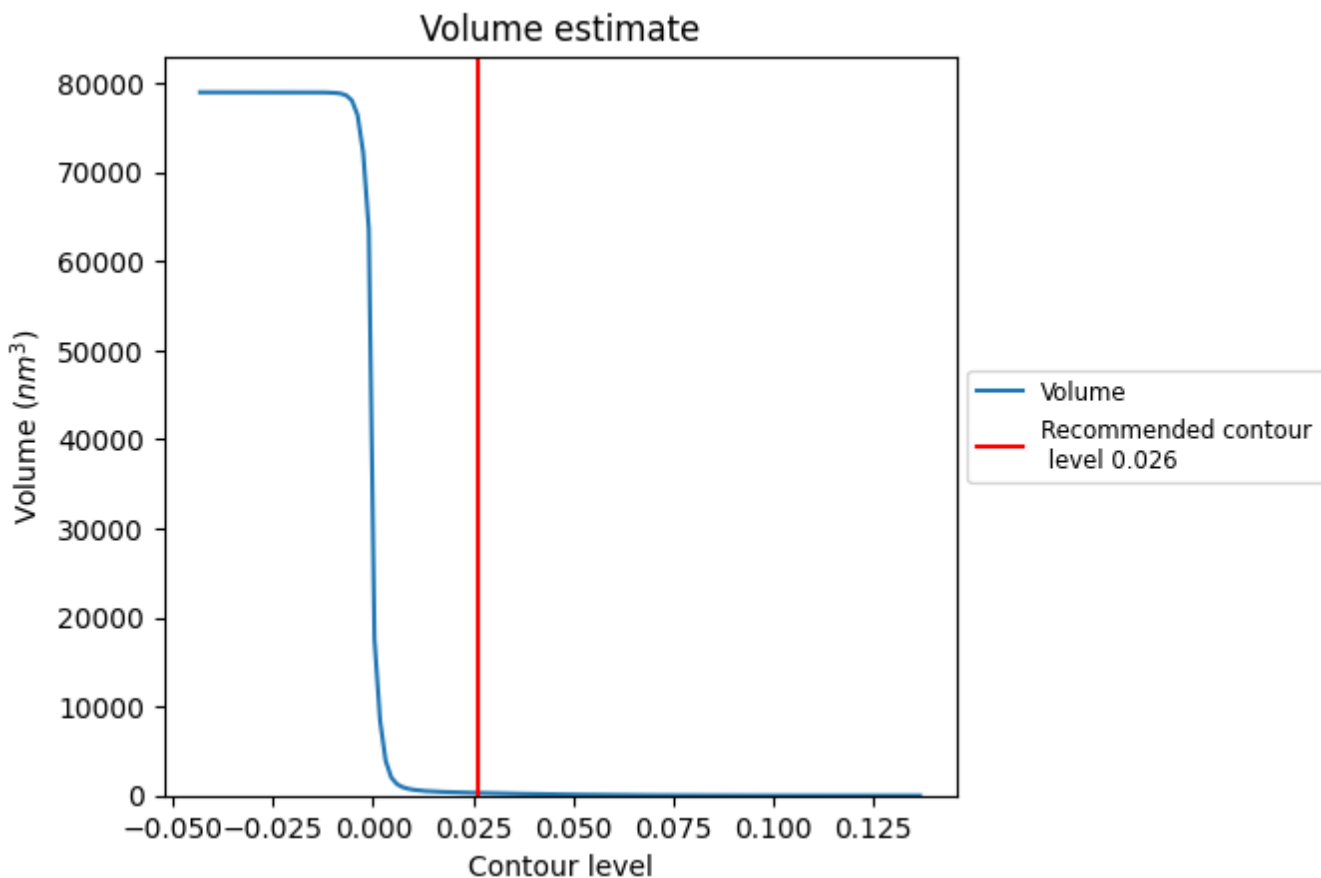
### 7.1 Map-value distribution [i](#)



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.



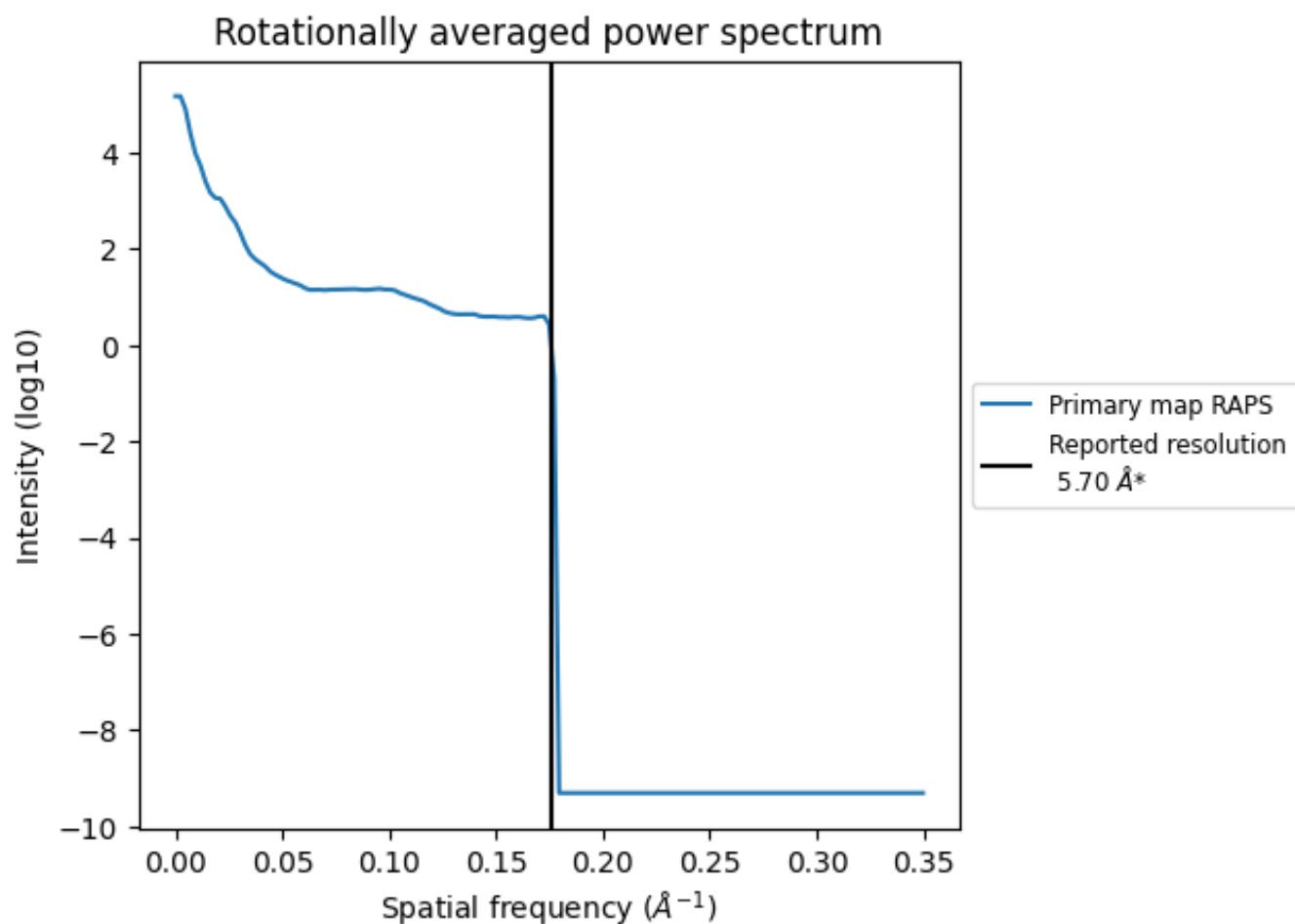
## 7.2 Volume estimate [i](#)



The volume at the recommended contour level is 298 nm<sup>3</sup>; this corresponds to an approximate mass of 269 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 [\(i\)](#)

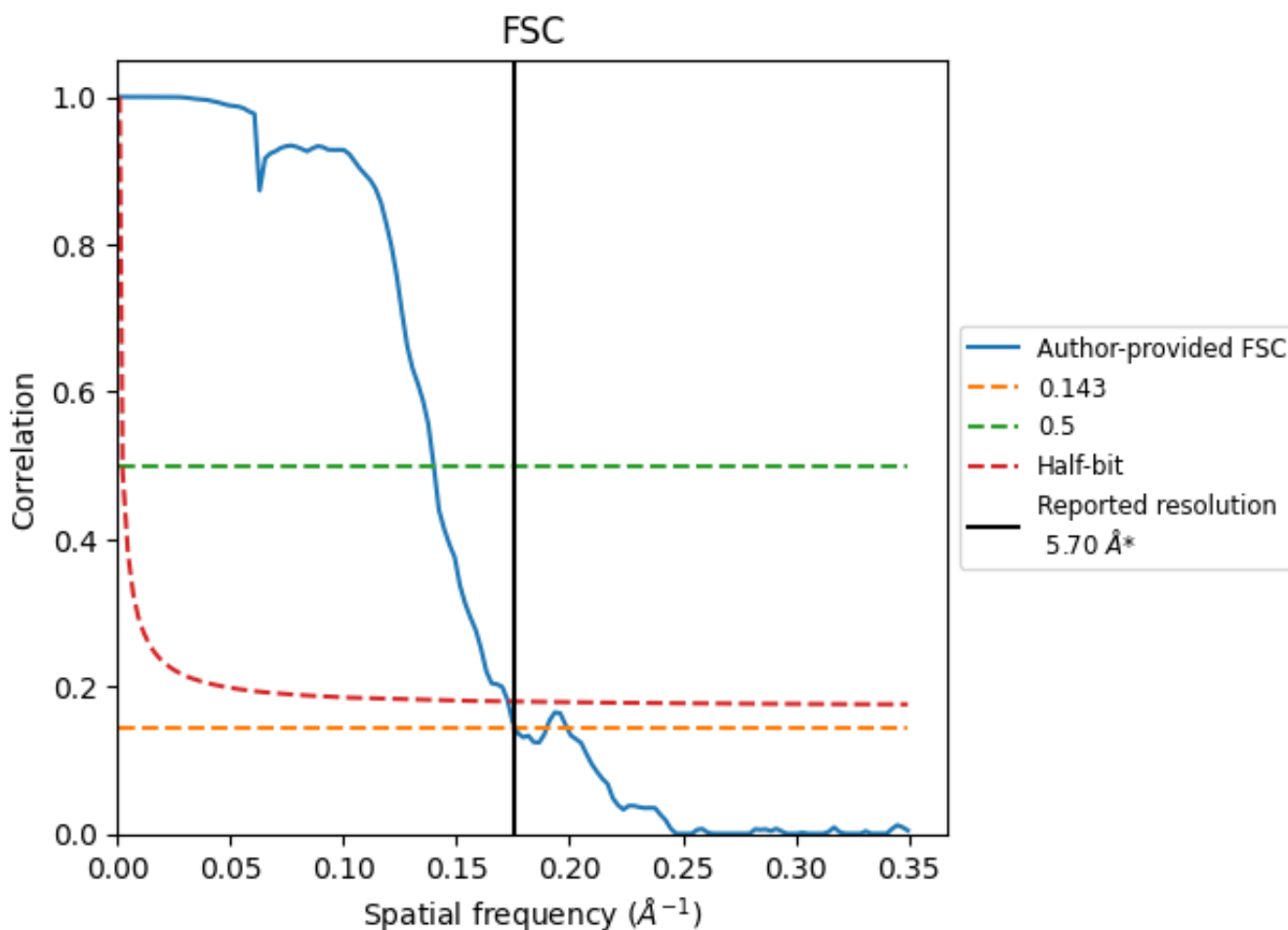


\*Reported resolution corresponds to spatial frequency of 0.175 Å<sup>-1</sup>

## 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 0.175 Å<sup>-1</sup>

## 8.2 Resolution estimates [i](#)

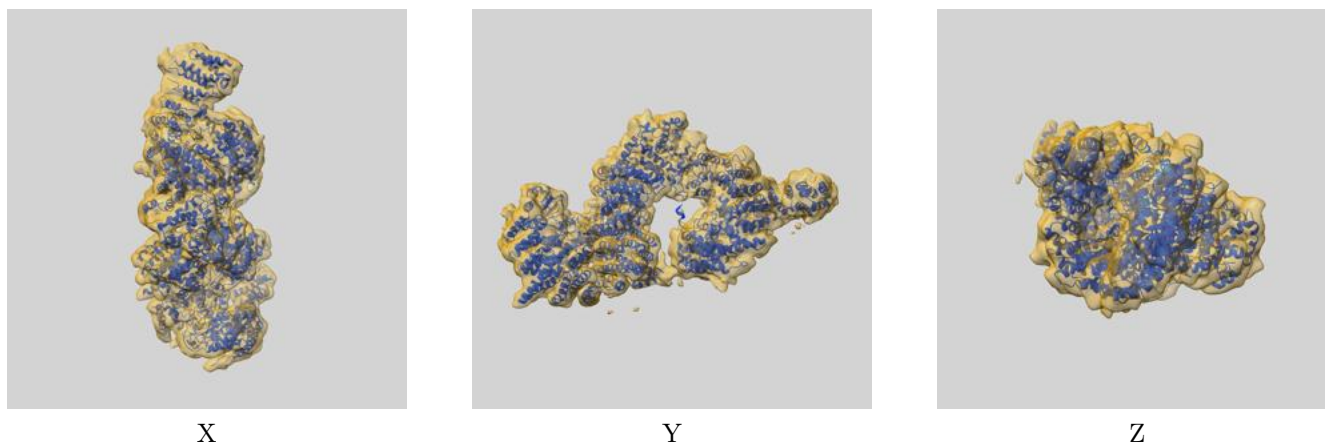
Resolution estimate (Å)	Estimation criterion (FSC cut-off)		
	0.143	0.5	Half-bit
Reported by author	5.70	-	-
Author-provided FSC curve	5.68	7.15	5.79
Unmasked-calculated*	-	-	-

\*Resolution estimate based on FSC curve calculated by comparison of deposited half-maps.

## 9 Map-model fit [i](#)

This section contains information regarding the fit between EMDB map EMD-3672 and PDB model 5NP1. Per-residue inclusion information can be found in section 3 on page 4.

### 9.1 Map-model overlay [i](#)



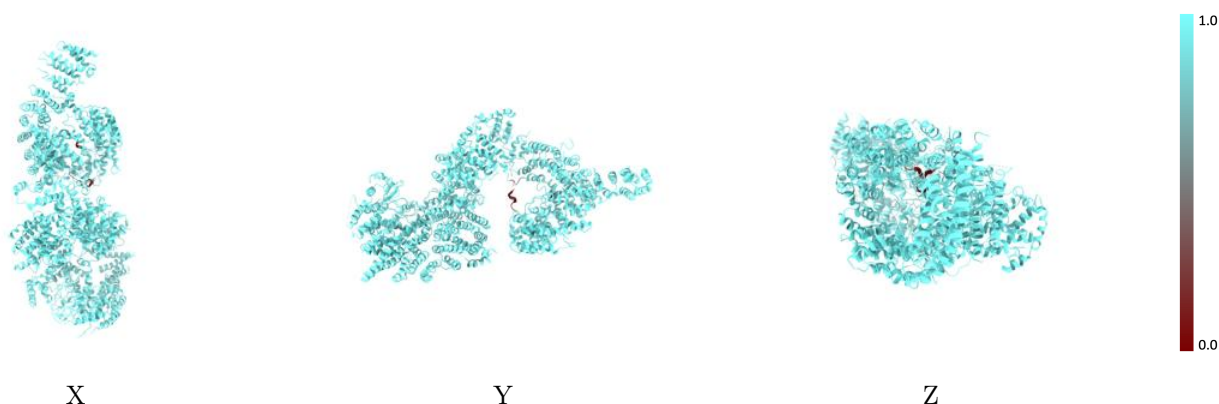
The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.026 at 50% transparency in yellow overlaid with a ribbon representation of the model coloured in blue. These images allow for the visual assessment of the quality of fit between the atomic model and the map.

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



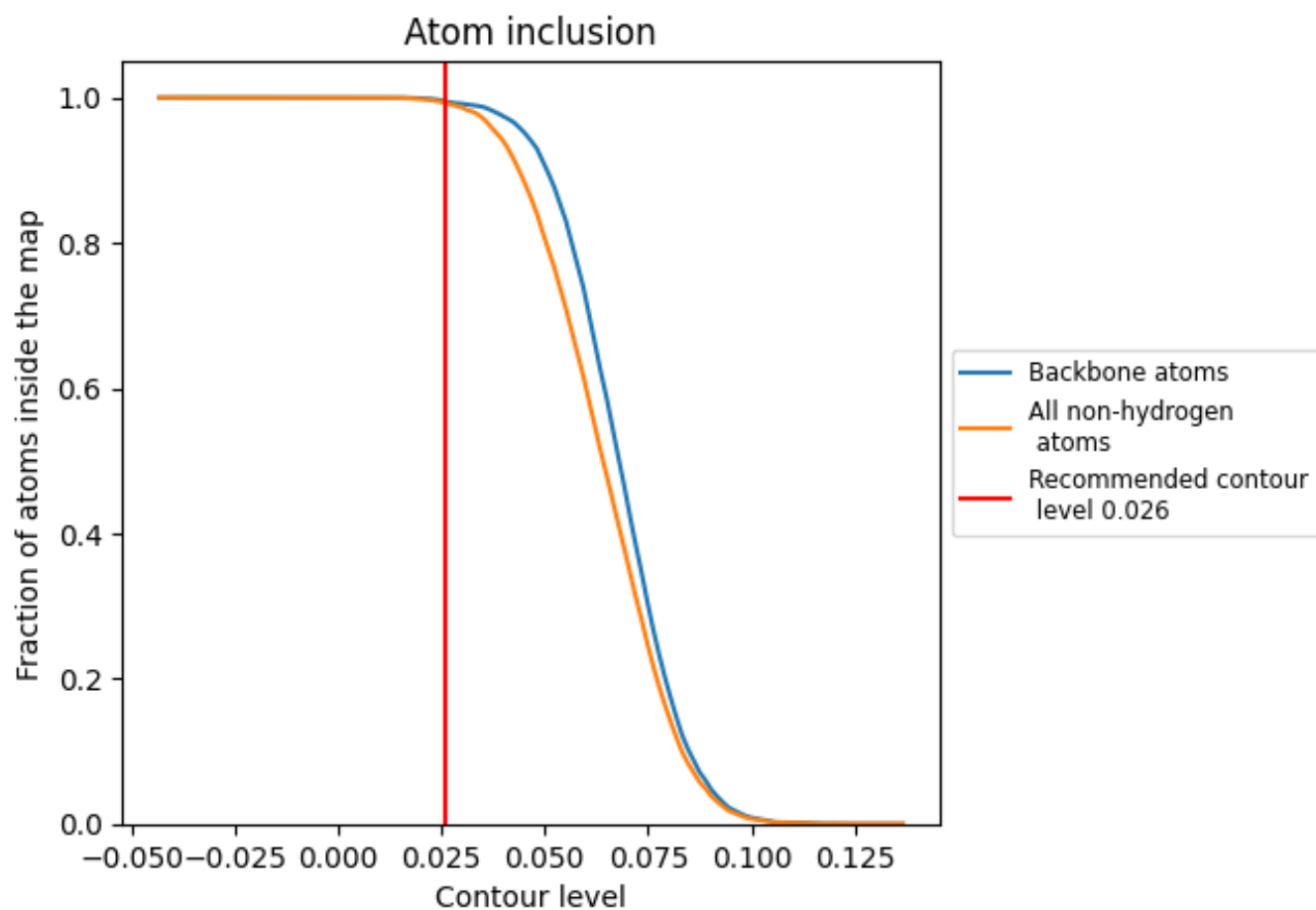
The images above show the model with each residue coloured according to its Q-score. This shows their resolvability in the map with higher Q-score values reflecting better resolvability. Please note: Q-score is calculating the resolvability of atoms, and thus high values are only expected at resolutions 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 (0.026).





## 9.4 Atom inclusion [i](#)



At the recommended contour level, 99% of all backbone atoms, 99% of all non-hydrogen atoms, are inside the map.

## 9.5 Map-model fit summary [i](#)

The table lists the average atom inclusion at the recommended contour level (0.026) and Q-score for the entire model and for each chain.

Chain	Atom inclusion	Q-score
All	 0.9925	 0.3540
A	 0.9925	 0.3540

