

Supplementary Figure S3

a

Docking peptide:	Start	mAb 447-52D conformation:																				
		9	9	9	9	8	8	8	7	7	6	End	22	21	20	19	21	20	19	20	19	19
1Q1Jp		0.66	0.70	0.81	0.85	0.62	0.76	0.81	0.62	0.66	0.65											
1Q1Jq		0.72	0.70	0.88	0.84	0.62	0.72	0.76	0.59	0.64	0.62											
3C2Ap		0.82	0.85	0.81	0.85	0.82	0.81	0.82	0.69	0.66	0.69											
3C2Aq		0.81	0.83	0.83	0.83	0.62	0.60	0.68	0.53	0.57	0.68											
3GHBp		0.60	0.67	0.71	0.68	0.63	0.73	0.61	0.59	0.61	0.61											
3GHBq		0.71	0.76	0.68	0.69	0.69	0.60	0.72	0.59	0.65	0.63											
1Q1Jp 1Q1Jq		0.72	0.75	0.86	0.88	0.64	0.77	0.82	0.62	0.69	0.68											
1Q1Jp 3C2Ap		0.80	0.85	0.84	0.87	0.80	0.82	0.84	0.67	0.78	0.71											
1Q1Jp 3C2Aq		0.80	0.80	0.84	0.87	0.67	0.74	0.81	0.64	0.67	0.69											
1Q1Jp 3GHBp		0.67	0.71	0.82	0.83	0.66	0.78	0.77	0.63	0.65	0.69											
1Q1Jp 3GHBq		0.74	0.79	0.82	0.84	0.68	0.75	0.82	0.61	0.69	0.65											
1Q1Jq 3C2Ap		0.82	0.85	0.84	0.86	0.81	0.81	0.82	0.71	0.76	0.71											
1Q1Jq 3C2Aq		0.79	0.82	0.86	0.88	0.67	0.70	0.76	0.60	0.63	0.69											
1Q1Jq 3GHBp		0.68	0.71	0.83	0.81	0.66	0.75	0.70	0.61	0.64	0.67											
1Q1Jq 3GHBq		0.73	0.78	0.85	0.82	0.67	0.69	0.76	0.61	0.68	0.63											
3C2Ap 3C2Aq		0.81	0.86	0.83	0.86	0.81	0.79	0.81	0.68	0.74	0.71											
3C2Ap 3GHBp		0.77	0.82	0.81	0.85	0.80	0.81	0.79	0.68	0.71	0.69											
3C2Ap 3GHBq		0.79	0.85	0.81	0.85	0.80	0.80	0.81	0.68	0.76	0.69											
3C2Aq 3GHBp		0.73	0.78	0.81	0.78	0.68	0.70	0.65	0.61	0.61	0.68											
3C2Aq 3GHBq		0.77	0.82	0.81	0.82	0.71	0.64	0.74	0.60	0.63	0.68											
3GHBp 3GHBq		0.70	0.75	0.73	0.70	0.69	0.71	0.65	0.60	0.61	0.64											
1Q1Jp 1Q1Jq 3C2Ap		0.80	0.85	0.85	0.87	0.79	0.82	0.83	0.68	0.79	0.73											
1Q1Jp 1Q1Jq 3C2Aq		0.78	0.81	0.86	0.89	0.68	0.76	0.81	0.64	0.69	0.71											
1Q1Jp 1Q1Jq 3GHBp		0.70	0.74	0.85	0.87	0.68	0.79	0.78	0.63	0.67	0.72											
1Q1Jp 1Q1Jq 3GHBq		0.74	0.80	0.85	0.87	0.68	0.75	0.82	0.60	0.71	0.67											
1Q1Jp 3C2Ap 3C2Aq		0.80	0.85	0.85	0.87	0.79	0.82	0.83	0.68	0.77	0.73											
1Q1Jp 3C2Ap 3GHBp		0.77	0.82	0.84	0.86	0.78	0.83	0.82	0.68	0.73	0.71											
1Q1Jp 3C2Ap 3GHBq		0.78	0.85	0.84	0.87	0.79	0.82	0.84	0.67	0.78	0.70											
1Q1Jp 3C2Aq 3GHBp		0.74	0.77	0.84	0.84	0.68	0.77	0.77	0.64	0.66	0.72											
1Q1Jp 3C2Aq 3GHBq		0.78	0.82	0.84	0.86	0.70	0.75	0.81	0.63	0.68	0.69											
1Q1Jp 3GHBp 3GHBq		0.73	0.76	0.82	0.83	0.70	0.77	0.78	0.62	0.65	0.68											
1Q1Jq 3C2Ap 3C2Aq		0.81	0.85	0.85	0.87	0.80	0.81	0.81	0.70	0.74	0.74											
1Q1Jq 3C2Ap 3GHBp		0.78	0.83	0.83	0.86	0.79	0.81	0.79	0.69	0.71	0.72											
1Q1Jq 3C2Ap 3GHBq		0.79	0.85	0.83	0.86	0.79	0.81	0.81	0.70	0.76	0.71											
1Q1Jq 3C2Aq 3GHBp		0.74	0.78	0.84	0.84	0.69	0.73	0.71	0.63	0.63	0.71											
1Q1Jq 3C2Aq 3GHBq		0.77	0.82	0.84	0.86	0.69	0.69	0.77	0.63	0.66	0.69											
1Q1Jq 3GHBp 3GHBq		0.72	0.76	0.81	0.80	0.69	0.74	0.71	0.61	0.64	0.68											
3C2Ap 3C2Aq 3GHBp		0.78	0.83	0.83	0.85	0.80	0.80	0.79	0.68	0.70	0.72											
3C2Ap 3C2Aq 3GHBq		0.79	0.86	0.82	0.86	0.80	0.80	0.81	0.69	0.74	0.71											
3C2Ap 3GHBp 3GHBq		0.77	0.84	0.81	0.85	0.78	0.81	0.79	0.68	0.71	0.68											
3C2Aq 3GHBp 3GHBq		0.74	0.80	0.80	0.78	0.71	0.70	0.68	0.62	0.60	0.69											
1Q1Jp 1Q1Jq 3C2Ap 3C2Aq		0.80	0.85	0.86	0.88	0.78	0.82	0.83	0.68	0.77	0.75											
1Q1Jp 1Q1Jq 3C2Ap 3GHBp		0.78	0.83	0.84	0.87	0.78	0.83	0.82	0.68	0.74	0.74											
1Q1Jp 1Q1Jq 3C2Ap 3GHBq		0.79	0.85	0.85	0.87	0.78	0.82	0.83	0.67	0.78	0.72											
1Q1Jp 1Q1Jq 3C2Aq 3GHBp		0.75	0.78	0.86	0.87	0.70	0.78	0.79	0.64	0.67	0.75											
1Q1Jp 1Q1Jq 3C2Aq 3GHBq		0.78	0.82	0.86	0.88	0.70	0.75	0.81	0.63	0.70	0.71											
1Q1Jp 1Q1Jq 3GHBp 3GHBq		0.74	0.77	0.84	0.86	0.70	0.79	0.79	0.62	0.67	0.71											
1Q1Jp 3C2Ap 3C2Aq 3GHBp		0.78	0.83	0.85	0.87	0.78	0.83	0.81	0.68	0.73	0.73											
1Q1Jp 3C2Ap 3C2Aq 3GHBq		0.78	0.85	0.84	0.87	0.79	0.82	0.83	0.68	0.77	0.72											
1Q1Jp 3C2Ap 3GHBp 3GHBq		0.77	0.83	0.84	0.87	0.78	0.83	0.82	0.67	0.73	0.70											
1Q1Jp 3C2Aq 3GHBp 3GHBq		0.75	0.80	0.83	0.84	0.71	0.77	0.78	0.64	0.65	0.72											
1Q1Jq 3C2Ap 3C2Aq 3GHBp		0.79	0.84	0.84	0.86	0.79	0.81	0.79	0.69	0.71	0.74											
1Q1Jq 3C2Ap 3C2Aq 3GHBq		0.80	0.86	0.84	0.86	0.79	0.81	0.81	0.70	0.75	0.73											
1Q1Jq 3C2Ap 3GHBp 3GHBq		0.78	0.84	0.82	0.85	0.78	0.81	0.79	0.69	0.72	0.71											
1Q1Jq 3C2Aq 3GHBp 3GHBq		0.75	0.80	0.83	0.84	0.70	0.74	0.72	0.63	0.63	0.72											
3C2Ap 3C2Aq 3GHBp 3GHBq		0.77	0.84	0.82	0.85	0.78	0.80	0.79	0.69	0.70	0.71											
1Q1Jp 1Q1Jq 3C2Ap 3C2Aq 3GHBp		0.79	0.83	0.85	0.87	0.77	0.83	0.81	0.69	0.73	0.76											
1Q1Jp 1Q1Jq 3C2Ap 3C2Aq 3GHBq		0.79	0.85	0.85	0.88	0.78	0.82	0.83	0.68	0.77	0.74											
1Q1Jp 1Q1Jq 3C2Ap 3GHBp 3GHBq		0.78	0.84	0.84	0.87	0.77	0.83	0.82	0.68	0.74	0.73											
1Q1Jp 1Q1Jq 3C2Aq 3GHBp 3GHBq		0.76	0.80	0.85	0.87	0.71	0.78	0.79	0.64	0.67	0.74											
1Q1Jp 3C2Ap 3C2Aq 3GHBp 3GHBq		0.78	0.84	0.84	0.87	0.78	0.83	0.81	0.69	0.73	0.73											
1Q1Jq 3C2Ap 3C2Aq 3GHBp 3GHBq		0.79	0.85	0.83	0.86	0.78	0.81	0.79	0.70	0.71	0.74											
1Q1Jp 1Q1Jq 3C2Ap 3C2Aq 3GHBp		0.79	0.84	0.85	0.87	0.77	0.83	0.81	0.69	0.73	0.75											

b

Docking peptide:	Start	mAb 447-52D conformation:																				
		9	9	9	9	8	8	8	7	7	6	End	22	21	20	19	21	20	19	20	19	19
1Q1Jp		0.07	0.07	0.06	0.05	0.08	0.06	0.06	0.08	0.07	0.07											
1Q1Jq		0.07	0.07	0.05	0.05	0.08	0.07	0.07	0.08	0.08	0.08											
3C2Ap		0.06	0.05	0.06	0.05	0.06	0.06	0.06	0.07	0.06	0.07											
3C2Aq		0.06	0.05	0.06	0.06	0.08	0.08	0.07	0.08	0.08	0.07											
3GHBp		0.08	0.08	0.07	0.07	0.07	0.07	0.08	0.08	0.08	0.08											
3GHBq		0.07	0.07	0.07	0.08	0.07	0.08	0.07	0.08	0.08	0.08											
1Q1Jp 1Q1Jq		0.07	0.07	0.05	0.04	0.08	0.06	0.06	0.08	0.07	0.07											
1Q1Jp 3C2Ap		0.07	0.05	0.06	0.05	0.07	0.06	0.06	0.08	0.06	0.07											
1Q1Jp 3C2Aq		0.06	0.06	0.05	0.05	0.08	0.07	0.06	0.08	0.07	0.07											
1Q1Jp 3GHBp		0.08	0.07	0.06	0.05	0.07	0.06	0.														