Supplemental Table S3

The salt-bridges and H-bonds found in the predicted interface between Spn-E and Squ dimer

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Salt bridges** |  |  |  |
| **#** | **Spn-E** |  **Dist. [Å]**  | **Squ** |
|  1  |  A:ARG 788[ NH2]  |  2.81  |  B:GLU 103[ OE2]  |
|  2  |  A:LYS 834[ NZ ]  |  2.79  |  B:GLU 107[ OE1]  |
|  3  |  A:LYS 834[ NZ ]  |  2.79  |  B:GLU 107[ OE2]  |
|  4  |  A:ARG 675[ NH2]  |  3.61  |  B:GLU 109[ OE1]  |
|  5  |  A:ARG 675[ NE ]  |  2.91  |  B:GLU 109[ OE2]  |
|  6  |  A:ARG 675[ NH2]  |  2.81  |  B:GLU 109[ OE2]  |
|  7  |  A:ASP 640[ OD1]  |  3.46  |  B:ARG 115[ NH1]  |
|  8  |  A:ASP 640[ OD2]  |  2.76  |  B:ARG 115[ NH1]  |
|  9  |  A:ASP 640[ OD1]  |  2.67  |  B:ARG 115[ NH2]  |
|  10  |  A:ASP 640[ OD2]  |  3.37  |  B:ARG 115[ NH2]  |
|  11  |  A:GLU1297[ OE1]  |  2.65  |  B:LYS 148[ NZ ]  |
|  12  |  A:GLU1274[ OE1]  |  3.25  |  B:LYS 163[ NZ ]  |
|  13  |  A:GLU1274[ OE2]  |  2.70  |  B:LYS 163[ NZ ]  |
|  |  |  |  |
| **Hydrogen bonds** |  |  |  |
| **#** | **Spn-E** |  **Dist. [Å]**  | **Squ** |
|  1  |  A:ARG 675[HH12]  |  2.44  |  B:ASP  99[ O  ]  |
|  2  |  A:ARG 675[HH11]  |  2.40  |  B:TRP 100[ O  ]  |
|  3  |  A:ARG 675[HH12]  |  1.93  |  B:ASP 102[ O  ]  |
|  4  |  A:ARG 675[HH22]  |  2.01  |  B:ASP 102[ O  ]  |
|  5  |  A:ARG 788[HH11]  |  1.94  |  B:GLU 103[ O  ]  |
|  6  |  A:ARG 788[HH21]  |  1.93  |  B:GLU 103[ OE2]  |
|  7  |  A:LYS 834[ HZ3]  |  1.80  |  B:GLU 107[ OE2]  |
|  8  |  A:ARG 675[ HE ]  |  1.98  |  B:GLU 109[ OE2]  |
|  9  |  A:ARG 675[HH21]  |  1.88  |  B:GLU 109[ OE2]  |
|  10  |  A:ARG 651[HH11]  |  1.77  |  B:MET 120[ O  ]  |
|  11  |  A:ARG1028[HH12]  |  1.87  |  B:ALA 123[ O  ]  |
|  12  |  A:ASN1281[HD22]  |  2.49  |  B:PHE 159[ O  ]  |
|  13  |  A:LEU1364[ H  ]  |  2.00  |  B:ARG 162[ O  ]  |
|  14  |  A:GLU1366[ H  ]  |  1.85  |  B:ILE 164[ O  ]  |
|  15  |  A:ASP 665[ OD2]  |  2.06  |  B:GLN  74[HE22]  |
|  16  |  A:ASP 640[ OD2]  |  1.77  |  B:ARG 115[HH11]  |
|  17  |  A:ASP 640[ OD1]  |  1.66  |  B:ARG 115[HH22]  |
|  18  |  A:SER1309[ OG ]  |  1.96  |  B:LYS 141[ HZ1]  |
|  19  |  A:GLU1306[ OE1]  |  2.21  |  B:ARG 144[ H  ]  |
|  20  |  A:ALA1301[ O  ]  |  1.91  |  B:ASN 145[HD22]  |
|  21  |  A:GLU1297[ OE1]  |  1.65  |  B:LYS 148[ HZ3]  |
|  22  |  A:TYR1285[ OH ]  |  1.97  |  B:ILE 153[ H  ]  |
|  23  |  A:PRO1347[ O  ]  |  2.03  |  B:ARG 162[HH12]  |
|  24  |  A:GLU1274[ OE2]  |  1.75  |  B:LYS 163[ HZ2]  |
|  25  |  A:LEU1364[ O  ]  |  1.89  |  B:ILE 164[ H  ]  |
|  26  |  A:LYS1236[ O  ]  |  2.17  |  B:ARG 166[HH11]  |
|  27  |  A:ASN1235[ O  ]  |  2.07  |  B:ARG 166[HH22] |