**Table supplement 2. Predictive analysis of protein binding.**

|  |  |
| --- | --- |
| **Interface Summary**      XML | 　 |
|  | Structure 1 | Structure 2 |    |
| Selection range | A | B |
| **class** | Protein | Protein |
| **symmetry operation** | x,y,z | ,, |
| **symmetry ID** | 1\_555 | 0\_555 |
| Number of atoms | 　 | 　 | 　 | 　 |
| **interface** | 107 | 1.00% | 57 | 82.60% |
| **surface** | 5694 | 54.70% | 66 | 95.70% |
| **total** | 10406 | 100.00% | 69 | 100.00% |
| Number of residues | 　 | 　 | 　 | 　 |
| **interface** | 33 | 2.50% | 10 | 100.00% |
| **surface** | 1226 | 92.00% | 10 | 100.00% |
| **total** | 1333 | 100.00% | 10 | 100.00% |
| Solvent-accessible area, Å | 　 | 　 | 　 | 　 |
| **interface** | 614 | 1.00% | 842.9 | 68.50% |
| **total** | 59982.9 | 100.00% | 1229.6 | 100.00% |
| Solvation energy, kcal/mol | 　 | 　 | 　 | 　 |
| **isolated structure** | -1184.8 | 100.00% | -4.8 | 100.00% |
| **gain on complex formation** | -2 | 0.20% | -5.8 | 120.00% |
| **average gain** | -2.6 | 0.20% | -4.7 | 97.60% |
| **P-value** | 0.573 | 　 | 0.344 | 　 |
| **Hydrogen bonds**      XML |
| **##** | Structure 1 | Dist. [Å] | Structure 2 |
|  1  |  A:SER 267[ N  ]  |  2.89  |  B:SER 120[ O  ]  |
|  2  |  A:SER 267[ OG ]  |  3.23  |  B:SER 120[ O  ]  |
|  3  |  A:GLY 268[ N  ]  |  3.80  |  B:SER 120[ O  ]  |
|  4  |  A:ASN 265[ ND2]  |  3.02  |  B:SER 120[ OG ]  |
|  5  |  A:HIS 160[ N  ]  |  3.11  |  B:TYR 121[ O  ]  |
|  6  |  A:HIS 160[ ND1]  |  3.87  |  B:TYR 121[ O  ]  |
|  7  |  A:SER 270[ N  ]  |  2.83  |  B:GLY 122[ O  ]  |
|  8  |  A:SER 162[ N  ]  |  3.15  |  B:HIS 123[ O  ]  |
|  9  |  A:SER 162[ OG ]  |  3.72  |  B:SER 125[ OG ]  |
|  10  |  A:ASN 265[ O  ]  |  2.95  |  B:SER 120[ N  ]  |
|  11  |  A:ASP 159[ OD2]  |  2.99  |  B:TYR 121[ N  ]  |
|  12  |  A:GLY 268[ O  ]  |  3.04  |  B:GLY 122[ N  ]  |
|  13  |  A:HIS 160[ O  ]  |  2.89  |  B:HIS 123[ N  ]  |
|  14  |  A:TYR 147[ OH ]  |  2.72  |  B:HIS 123[ ND1]  |
|  15  |  A:ASP 159[ OD1]  |  2.94  |  B:HIS 123[ NE2]  |
|  16  |  A:SER 270[ O  ]  |  3.08  |  B:LEU 124[ N  ]  |
|  17  |  A:SER 162[ OG ]  |  2.81  |  B:SER 125[ N  ]  |
|  18  |  A:GLU 376[ OE2]  |  2.61  |  B:SER 125[ OG ]  |
|  19  |  A:SER 162[ O  ]  |  3.82  |  B:ILE 126[ N  ]  |
| **Salt bridges**      XML |
| **##** | Structure 1 | Dist. [Å] | Structure 2 |
|  1  |  A:ASP 159[ OD1]  |  2.94  |  B:HIS 123[ NE2]  |
| 　 |
| 　 |