

Supplementary Information

Exploring the Conformational Transition Between the Fully Folded and Locally Unfolded Substates of the *Escherichia coli* thiol peroxidase

Diego S. Vazquez^{1,2,8,*}, Ari Zeida³, William A. Agudelo⁴, Mónica Montes⁵, Gerardo Ferrer-
Sueta⁶, and Javier Santos^{7,8,*}

¹Laboratorio de Expresión y Plegado de Proteínas. Departamento de Ciencia y Tecnología, Universidad Nacional de Quilmes, Roque Sáenz Peña 352, Bernal, Buenos Aires, Argentina. ²Instituto Multidisciplinario de Biología Celular (IMBICE), Calle 526 y Camino General Belgrano, La Plata, Buenos Aires, Argentina. ³Departamento de Bioquímica y Centro de Investigaciones Biomédicas (CEINBIO), Facultad de Medicina, Universidad de la República, Avda. General Flores 2125, Montevideo, Uruguay. ⁴Fundación Instituto de Inmunología de Colombia (FIDIC), Avda. 50 N° 26-20, Bogotá D.C., Colombia. ⁵Instituto de Química y Fisicoquímica Biológicas (IQUIFIB) “Prof. Dr. Alejandro C. Paladini”, Universidad de Buenos Aires and CONICET, Junín 956, Ciudad Autónoma de Buenos Aires, Argentina. ⁶Laboratorio de Fisicoquímica Biológica, Instituto de Química Biológica and CEINBIO, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Iguá 4225, Montevideo, Uruguay. ⁷Instituto de Biociencias, Biotecnología y Biología Traslacional (iB³). Departamento de Fisiología y Biología Molecular y Celular, y Departamento de Química Biológica de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Intendente Güiraldes 2160, Ciudad Autónoma de Buenos Aires, Argentina. ⁸Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Av. Rivadavia 1917 (C1033AAJ), Ciudad Autónoma de Buenos Aires, Argentina.

Figure S1

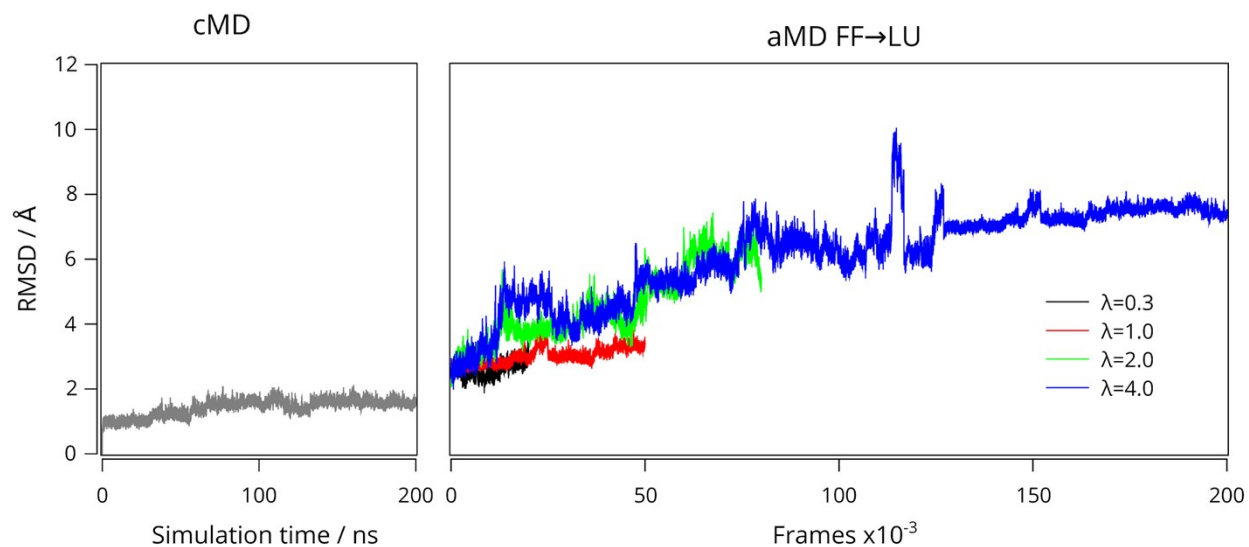


Figure S1: RMSD Analysis of aMD Simulations. RMSD-based convergence analysis of the aMD simulations starting from the FF conformation at lambda 0.3 (black line), 1.0 (red line), 2.0 (green line) and 4.0 (blue line). In addition, the RMSD values corresponding to the cMD simulation carried out previously to run the aMD simulations are shown in the left panel. The last frame of the cMD simulation was used as reference for aMD RMSD calculations.

Figure S2.

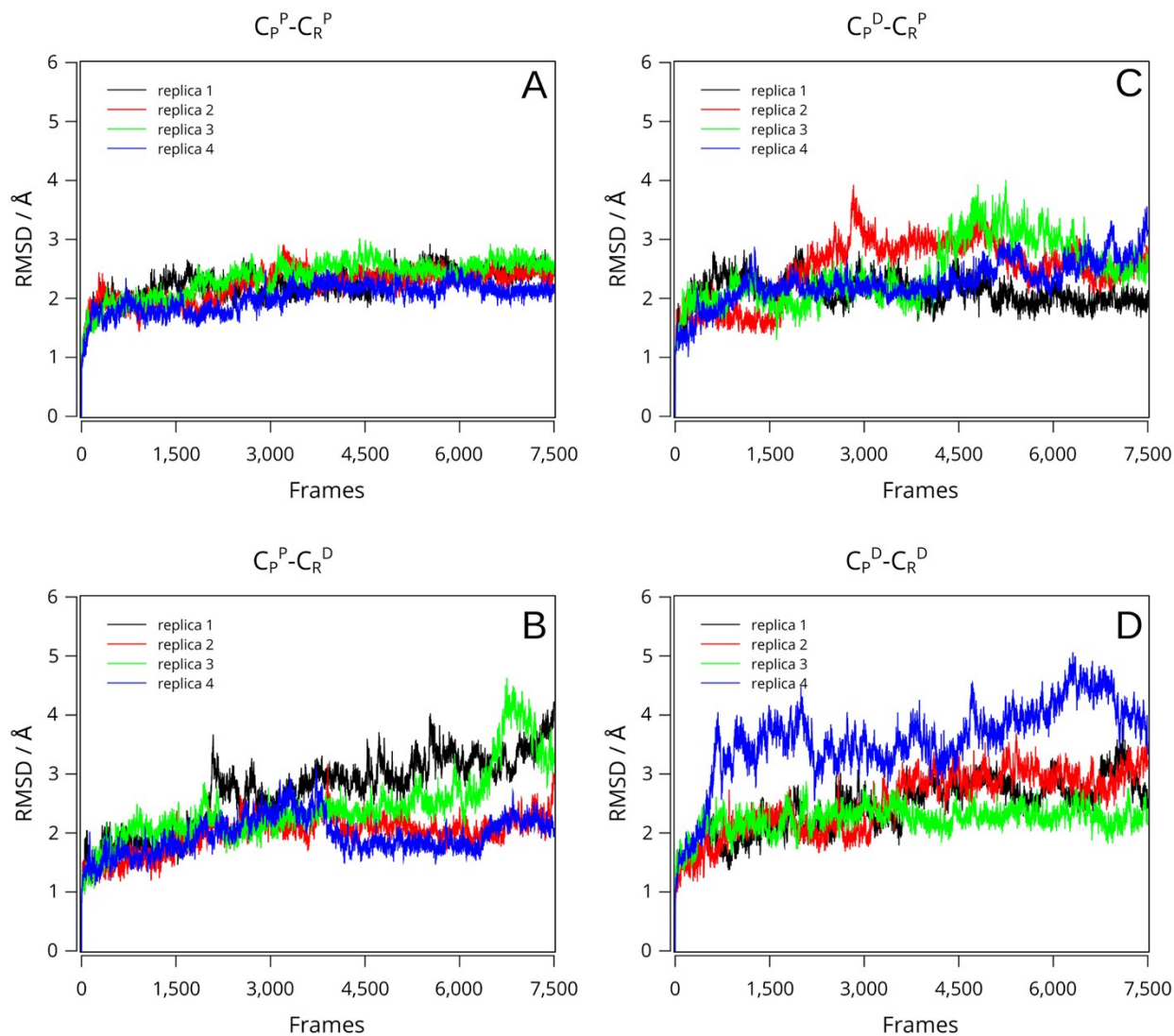


Figure S2: *RMSD Analysis of aMD Simulations.* RMSD-based convergence analysis for aMD simulations starting from the LU conformation at lambda 1.0 and for the four replicas performed in each combination of protonation state for the catalytic cysteine residues denoted as $C_P^P - C_R^P$ (A), $C_P^P - C_R^D$ (B), $C_P^D - C_R^P$ (C) and $C_P^D - C_R^D$ (D).