

Supplementary Material (ESI) for Metallomics
This journal is (c) The Royal Society of Chemistry 2011

Table S1. Selected properties of the protein-protein interfaces in the complexes analyzed. IF area: interface area (Å²); IF/S: interface/total surface area ratio; NP at: fraction of polar atoms at the interface; FB at: fraction of fully buried atoms at the interface; RPS: residue propensity score; LD: local density; redox center: redox center of the partner; distance: distance (Å) between the cyt c heme iron and the center of mass of the redox center of the partner; group: configuration of the interaction, as defined in Figure 5)

Interaction	PDB	cyt c domain	partner domains	IF area (c)	IF area (p)	IF area (total)	IF/S (c)	IF/S (p)	IF/S (total)	NP at (c)	NP at (p)	NP at (total)	FB at (c)	FB at (p)	FB at (total)	RPS (c)	RPS (p)	RPS (total)	LD (c)	LD (p)	redox center	distance	Group
Cyt c ₂ -PRC	1l9b	C (124 aa)	L (281 aa), M (267 aa)	606	631	1237	0,1	0,03	0,04	0,58	0,64	0,61	0,23	0,29	0,26	-2,27	-0,28	-2,55	30,5	32,2	BCL (Mg)(avg)	21,2	Pyrrrole II
Cyt c-Fab E8	1wej	F (105 aa)	L (214 aa), H (223 aa)	616	532	1148	0,1	0,03	0,05	0,61	0,59	0,6	0,31	0,38	0,35	-2,79	-0,23	-3,02	34,1	37,5	n.a.	n.a.	Methyl 8
Cyt c _{552-aa} oxidase	1zyy	C (100 aa)	B (252 aa)	624	676	1300	0,12	0,05	0,07	0,58	0,63	0,61	0,38	0,34	0,36	-2,6	1,4	-1,2	31,8	34,9	CuA (avg)	19,0	Pyrrrole II
Cyt c _{552-ba} oxidase	2fwl	A (129 aa)	B (134 aa)	565	654	1219	0,1	0,09	0,09	0,57	0,63	0,6	0,35	0,27	0,31	0,04	0,71	0,75	32,5	33,5	CuA (avg)	16,3	Pyrrrole II
Cyt c ₅₅₁ -amicyanin	2gc4	D (147 aa)	C (105 aa)	445	401	846	0,06	0,08	0,07	0,63	0,61	0,62	0,33	0,18	0,26	-1,26	-1,42	-2,68	33,1	24,6	Cu	24,5	Propionate 7
Cyt c-CCP	2pcc	B (108 aa)	A (294 aa)	545	581	1127	0,1	0,05	0,06	0,61	0,55	0,58	0,12	0,15	0,14	-1,9	-0,95	-2,85	26,5	22,0	Heme (Fe)	26,4	Pyrrrole II
Cyt c-CuNiR	2zon	G (81 aa)	A (334 aa)	510	519	1029	0,12	0,03	0,05	0,66	0,67	0,67	0,36	0,36	0,36	0,35	-0,04	0,31	31,6	31,7	Cu	17,1	Pyrrrole II
cyt c-cyt c1	3cx5	W (108 aa)	O (248 aa)	434	443	877	0,08	0,03	0,04	0,53	0,56	0,55	0,02	0,04	0,03	-2,01	-0,61	-2,62	22,2	19,3	Heme (Fe)	17,4	Pyrrrole II
cyt c1-cyt c	3cx5	O (248 aa)	W (108 aa)	443	434	877	0,03	0,08	0,04	0,56	0,53	0,55	0,04	0,02	0,03	-0,61	-2,01	-2,62	19,3	22,2	Heme (Fe)	17,4	Pyrrrole II
SoxX-SoxA <i>R.sul.</i>	1h32	B (135 aa)	A (261 aa)	1246	1272	2518	0,16	0,11	0,13	0,63	0,67	0,65	0,31	0,4	0,35	1,29	2,43	3,72	43,0	48,2	Heme (Fe)	18,9	Pyrrrole II
SoxX-SoxA <i>P.pan.</i>	2c1d	B (137 aa)	A (264 aa)	1244	1270	2514	0,16	0,11	0,13	0,67	0,6	0,64	0,33	0,48	0,4	0,88	1,67	2,55	43,0	46,1	Heme (Fe)	19,6	Pyrrrole II
SoxA-SoxX <i>R.sul.</i>	1h32	A (261 aa)	B (135 aa)	1272	1246	2518	0,11	0,16	0,13	0,67	0,63	0,65	0,4	0,31	0,35	2,43	1,29	3,72	48,2	43,0	Heme (Fe)	18,9	Pyrrrole II
SoxA-SoxX <i>P.pan.</i>	2c1d	A (264 aa)	B (137 aa)	1270	1244	2514	0,11	0,16	0,13	0,6	0,67	0,64	0,48	0,33	0,4	1,67	0,88	2,55	46,1	43,0	Heme (Fe)	19,6	Pyrrrole II
<i>p</i> -cresol methylhydroxylase	1wve	C (75 aa)	A (515 aa)	960	971	1930	0,24	0,05	0,08	0,62	0,68	0,65	0,31	0,31	0,31	1,72	-0,54	1,18	44,9	36,7	FAD (avg)	19,2	Pyrrrole II
SorB-SorA	2blf	B (511-581)	A (373 aa)	783	871	1654	0,21	0,06	0,09	0,57	0,6	0,58	0,37	0,31	0,34	0,26	0,56	0,82	44,1	34,9	Mo	16,6	Propionate 7
cyt c ₁ -ISP interaction	1be3	D (241 aa)	M (196 aa)	323	351	675	0,02	0,03	0,02	0,54	0,66	0,61	0,19	0,21	0,2	0,25	1,27	1,52	20,9	33,8	Fe2S2 (Fe avg)	16,0	Propionate 7
FixO-FixN	3mk7	B (41-202)	A (466 aa)	2312	2423	4735	0,29	0,13	0,18	0,63	0,65	0,64	0,43	0,39	0,41	1,98	5,5	7,48	52,7	51,6	Heme (Fe)	19,8	-
FixO-FixP	3mk7	B (41-202)	C (303 aa)	842	810	1652	0,1	0,05	0,07	0,62	0,64	0,63	0,23	0,18	0,21	0,11	0,51	0,62	35,1	28,2	Heme (Fe)	20,8	Propionate 7
FixP-FixO	3mk7	C (303 aa)	B (41-202)	810	842	1652	0,05	0,1	0,07	0,64	0,62	0,63	0,18	0,23	0,21	0,51	0,11	0,62	28,2	35,1	Heme (Fe)	20,8	Pyrrrole II
Di-heme CCP (Nterm-Cterm) <i>P.aer.</i>	1eb7	A (18-163)	A (166-302)	993	1033	2026	0,13	0,14	0,14	0,63	0,61	0,62	0,37	0,38	0,38	0,18	1,48	1,66	43,1	43,6	Heme (Fe)	20,9	Propionate 7
Di-heme CCP (Nterm-Cterm) <i>N.eur.</i>	1iqc	A (12-149)	A (152-284)	927	922	1850	0,13	0,13	0,13	0,64	0,64	0,64	0,34	0,37	0,35	2,04	-0,26	1,78	42,6	41,6	Heme (Fe)	21,0	Propionate 7
Di-heme CCP (Cterm-Nterm) <i>P.aer.</i>	1eb7	A (166-302)	A (18-163)	1033	993	2026	0,14	0,13	0,14	0,61	0,63	0,62	0,38	0,37	0,38	1,48	0,18	1,66	43,6	43,1	Heme (Fe)	20,9	Propionate 7
Di-heme CCP (Cterm-Nterm) <i>N.eur.</i>	1iqc	A (152-284)	A (12-149)	922	927	1850	0,13	0,13	0,13	0,64	0,64	0,64	0,37	0,34	0,35	-0,26	2,04	1,78	41,6	42,6	Heme (Fe)	21,0	Propionate 7
cyt c ₄ (Nterm-Cterm) <i>A.fer.</i>	1h1o	A (12-89)	A (98-183)	758	773	1530	0,17	0,17	0,17	0,54	0,56	0,55	0,49	0,47	0,48	-0,49	-0,47	-0,96	47,1	45,1	Heme (Fe)	18,7	Propionate 7
cyt c ₄ (Nterm-Cterm) <i>P.stu.</i>	1m70	A (1-88)	A (97-190)	677	757	1434	0,16	0,15	0,15	0,55	0,54	0,55	0,37	0,37	0,37	-2,64	-1,65	-4,29	42,0	41,1	Heme (Fe)	19,2	Propionate 7
cyt c ₄ (Cterm-Nterm) <i>A.fer.</i>	1h1o	A (98-183)	A (12-89)	773	758	1530	0,17	0,17	0,17	0,56	0,54	0,55	0,47	0,49	0,48	-0,47	-0,49	-0,96	45,1	47,1	Heme (Fe)	18,7	Propionate 7
cyt c ₄ (Cterm-Nterm) <i>P.stu.</i>	1m70	A (97-190)	A (1-88)	757	677	1434	0,15	0,16	0,15	0,54	0,55	0,55	0,37	0,37	0,37	-1,65	-2,64	-4,29	41,1	42,0	Heme (Fe)	19,2	Propionate 7
SoxA (Nterm-Cterm)	1h32	A (55-143)	A (157-261)	867	854	1721	0,16	0,13	0,14	0,67	0,66	0,67	0,31	0,31	0,31	1,6	1,08	2,68	38,9	38,1	Heme (Fe)	31,3	Methyl 8
SoxA (Cterm-Nterm)	1h32	A (157-261)	A (55-143)	854	867	1721	0,13	0,16	0,14	0,66	0,67	0,67	0,31	0,31	0,31	1,08	1,6	2,68	38,1	38,9	Heme (Fe)	31,3	Methyl 8
<i>cd</i> ₁ nitrite reductase	1qks	A (9-134)	A (137-567)	1373	1086	2459	0,2	0,09	0,12	0,66	0,53	0,59	0,44	0,47	0,46	-0,16	-0,96	-1,12	46,9	48,0	Heme d1 (Fe)	20,6	Pyrrrole II
FixP (Nterm-Cterm)	3mk7	C (1-183)	C (186-275)	478	426	904	0,03	0,1	0,05	0,54	0,56	0,55	0,38	0,26	0,32	0,17	-0,4	-0,23	39,2	31,3	Heme (Fe)	18,7	Propionate 7
FixP (Cterm-Nterm)	3mk7	C (186-275)	C (1-183)	426	478	904	0,1	0,03	0,05	0,56	0,54	0,55	0,26	0,38	0,32	-0,4	0,17	-0,23	31,3	39,2	Heme (Fe)	18,7	Propionate 7

Table S2. Comparison of selected properties of the protein-protein interfaces in the permanent complexes analyzed for which extra residues are present in the proteins containing cyt c domains.
IF area: interface area (Å²); IF/S: interface/total surface area ratio; NP at: fraction of polar atoms at the interface; FB at: fraction of fully buried atoms at the interface; RPS: residue propensity score; LD: local density

Interaction	PDB	cyt c chain	partner chain	IF area (c)	IF area (p)	IF area (total)	IF/S (c)	IF/S (p)	IF/S (total)	NP at (c)	NP at (p)	NP at (total)	FB at (cy)	FB at (p)	FB at (total)	RPS (c)	RPS (p)	RPS (total)	LD (c)	LD (p)
SorB-SorA	2blf	B (511-581)	A (373 aa)	782,83	871,3	1654,13	0,21	0,06	0,09	0,57	0,6	0,58	0,37	0,31	0,34	0,26	0,56	0,82	44,09	34,89
SorB-SorA (whole chains)	2blf	B (81 aa)	A (373 aa)	1327,28	1342,12	2669,4	0,25	0,09	0,13	0,62	0,65	0,64	0,35	0,31	0,33	0,41	2,5	2,91	41,6	40,49
FixO-FixN	3mk7	B (41-202)	A (466 aa)	2311,95	2422,65	4734,6	0,29	0,13	0,18	0,63	0,65	0,64	0,43	0,39	0,41	1,98	5,5	7,48	52,68	51,55
FixO-FixN (whole chains)	3mk7	B (197 aa)	A (466 aa)	3639,85	3546,88	7186,73	0,32	0,2	0,25	0,66	0,68	0,67	0,41	0,41	0,41	4,07	11,83	15,9	49,4	54,06
FixO-FixP	3mk7	B (41-202)	C (303 aa)	841,8	809,91	1651,71	0,1	0,05	0,07	0,62	0,64	0,63	0,23	0,18	0,21	0,11	0,51	0,62	35,08	28,19
FixO-FixP (whole chains)	3mk7	B (197 aa)	C (303 aa)	1170,37	1113,11	2283,48	0,1	0,07	0,08	0,65	0,66	0,66	0,24	0,22	0,23	0,19	3,45	3,64	31,91	26,94

Table S3. Spatially equivalent contact residues in cyt c domains that interact in the "methyl 8" mode. Residues are colored as blue=basic, red=acidic, light green=polar neutral, yellow=non polar, orange=aromatic, purple= heme groups.

TRANSIENT	FUSED	
1wej (F vs L+H)	1h32 (A 55-143 vs A 157-261)	1h32 (A 157-261 vs A 55-143)
	MET 55	
	PHE 57	THR 158
VAL 3	VAL 58	
PHE 36	ARG 91	
GLY 37	ALA 92	VAL 254
		PHE 202
	PRO 95	PRO 203
		TYR 205
		ALA 210
		ARG 211
	VAL 104	LEU 212
		ASN 213
THR 58	THR 106	ALA 214
LYS 60		
		VAL 215
GLU 61	GLU 108	HIS 216
GLU 62	GLN 109	ASP 217
		ARG 220
	TYR 126	VAL 233
	ILE 127	GLY 234
	THR 132	VAL 239
	ALA 133	
	VAL 135	GLU 242
ALA 96	ALA 136	LEU 243
LYS 99	ALA 139	ALA 246
LYS 100	SER 140	
THR 102	SER 142	
ASN 103		
GLU 104		
	ARG 143	
		GLU 255
		GLY 256
		PRO 257

Table S4. Spatially equivalent contact residues in cyt c domains that interact in the "pyrrole II" mode. Residues are colored as blue=basic, red=acidic, light green=polar neutral, yellow=non polar, orange=aromatic, purple=heme groups.

TRANSIENT							PERMANENT						FUSED
119b (C vs L+M)	1zyy (C vs B)	2fwl (A vs B)	2pcc (B vs A)	2zon (G vs A)	3cx5 (O vs W)	3cx5 (W vs O)	1h32 (A vs B)	1h32 (B vs A)	1wve (C vs A)	2c1d (A vs B)	2c1d (B vs A)	3mk7 (C vs B)	1qks (A 9-134 vs A 137-567)
													THR 21
													ASP 22
													ARG 24
													TYR 25
													GLU 26
													PRO 27
													SER 28
													LEU 29
													ASP 30
													ASN 31
													LEU 32
													GLN 35
												GLN 95	
												GLU 96	
												TRP 99	
												GLU 100	
												GLU 102	
												ALA 106	
												TYR 110	
								ARG 37			ASN 56		
								SER 38					
							THR 168				THR 197		
							ARG 169				ARG 198		
							GLY 171				GLY 200		
							GLN 172				GLN 201		
							LEU 173				LEU 202		
							ASP 174				GLU 203		
							LEU 175				MET 204		
			LYS 10										
LYS 10													
ASN 13				ARG 17		LYS 16							
			LEU 14										
			THR 17	SER 18		THR 17			LYS 613			ASN 141	
GLN 14	LYS 13		ARG 18	ALA 19		ARG 18			VAL 614		ASN 60	TYR 142	
	LYS 15			VAL 21				ILE 43			VAL 62		ALA 66
THR 17	ALA 16	GLY 13	GLN 21	VAL 22	ALA O 103	GLN 21	SER 179	ALA 44	HIS 617	ASN 208	ALA 63	ILE 145	GLY 67
								GLN 55			GLU 74		
ARG 32								PHE 56			PHE 75		
	CYS 17	CYS 14	CYS 22						CYS 618	CYS 209	CYS 64	CYS 146	
	LYS 19	GLN 16											GLY 70

Supplementary Material (ESI) for Metallomics
 This journal is (c) The Royal Society of Chemistry 2011
 c0mt00108b

		THR 117	LYS 78										
		PRO 118											
			LYS 92			LYS 92							
				GLY 66									
				GLY 67									
				THR 68			TYR 170			TYR 199			
							PHE 101				PHE 120		
							ASN 102				VAL 121		
							ARG 103				ARG 122		
							PRO 104				PRO 123		
							GLY 105				GLY 124		
							ALA 107				GLY 126		
													MET 106
							PHE 108				PHE 127		PRO 107
											SER 128		
							SER 110				GLY 129		
							LYS 111				LYS 130		
							PRO 112				ALA 131		
							ILE 113						
							ILE 117				LEU 136		
							ARG 118				ALA 137		
							PRO 119				PRO 138		
				ALA 69	PHE O 230		LEU 120	TYR 657			ILE 139	TYR 285	
				ALA 70								LEU 286	
					ASP O 231			SER 656					
					ASP O 232								
					MET O 233								
							PHE 231			PHE 260			
											LYS 290		
												ASN 108	
												TRP 109	
												PRO 134	
HEM 1009	HEC 101	HEC 132	HEM 109	HEM 200	HEM 4023	HEM 4026		HEC 1139	HEM 699		HEC 1158	HEC 322	

Table S6. Contact residues in the cyt c domain FixO that interacts with FixN. Residues are colored as blue=basic, red=acidic, light green=polar neutral, yellow=non polar, orange=aromatic, purple= heme group.

PERMANENT
3mk7 (B vs A)
LEU 54
ASP 58
ILE 61
ARG 62
GLU 63
GLY 64
GLY 67
CYS 68
SER 70
MET 72
ARG 74
PRO 75
PHE 76
ARG 77
ALA 78
GLU 81
ARG 82
TYR 83
SER 87
VAL 88
ALA 89
SER 92
VAL 93
TYR 94
ASP 95
HIS 96
PRO 97
PHE 98
LEU 99
TRP 100
GLY 101
SER 102
LYS 103
ARG 104
THR 105
GLY 106
PRO 107
ARG 129
VAL 132
GLU 134
SER 135
LYS 136
MET 137
PRO 138
SER 139
TYR 140
TRP 142
ASP 152
LYS 155
LYS 156
ALA 159
LEU 160
MET 162
LEU 163
HEC 211