

## Supporting Information

**Text S1.** Sequence information for the three proteins.

**WW domain (1E0L):**

Sequence: GATAV-SEWTE-YKTAD-GKTY Y-YNNRT-LESTW-EKPQE-LK (1-37)

Hydrophobic residue numbers: 2 4 5 8 14 26 30 33 36

Aromatic residue numbers: 8 11 19 20 21 30

**BBA protein (1FME):**

Sequence: EQYTA-KYKGR-TFRNE-KELRD-FIEKF-KGR (1-28)

Hydrophobic residue numbers: 5 12 18 21 22 25

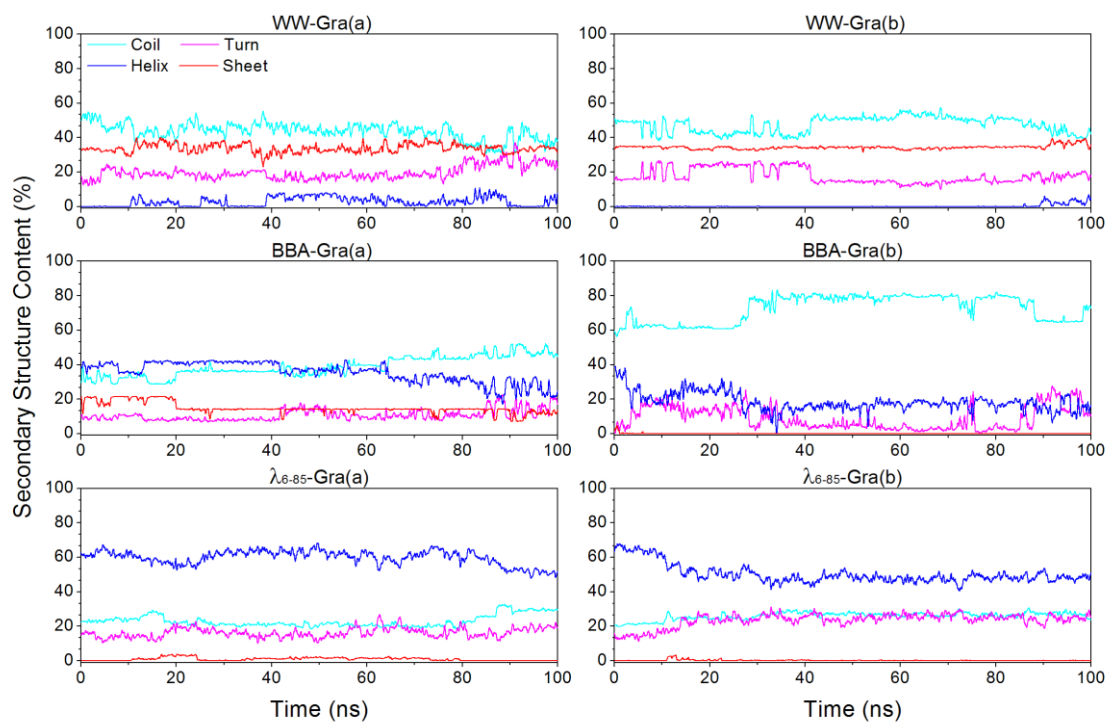
Aromatic residue numbers: 3 7 12 21 25

**$\lambda$  repressor (1LMB):**

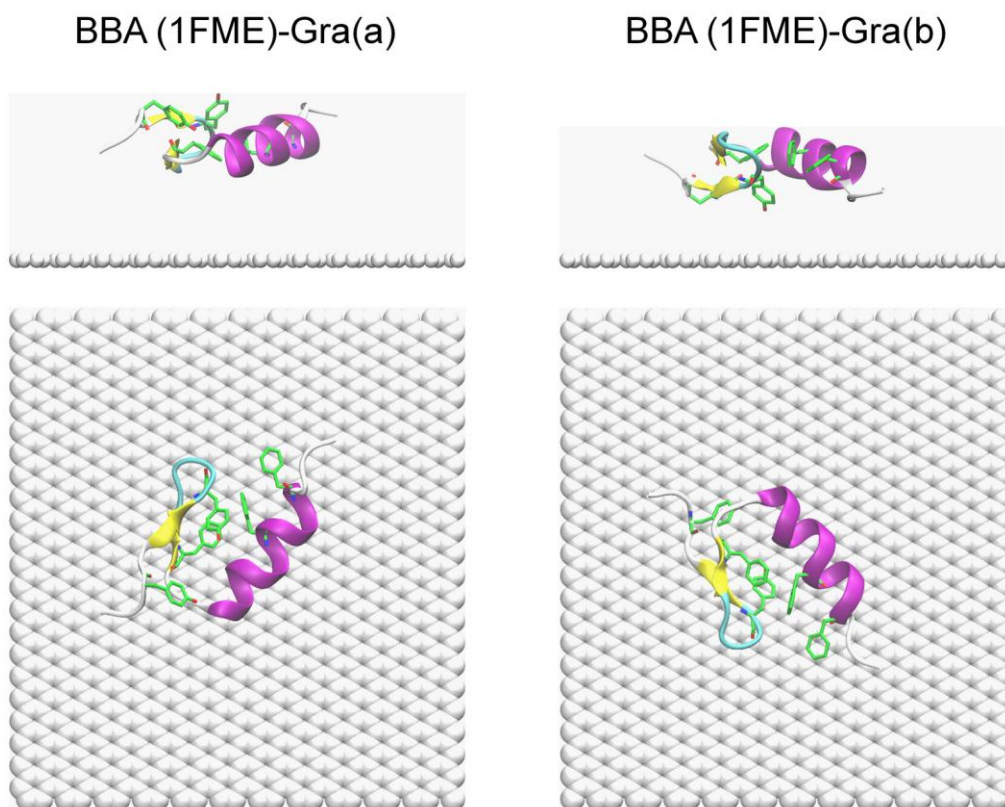
Sequence: PLTQE-QLEDA-RRLKA-IYEKK-KNELG-LSQES-VADKM-GMGQS-GVGAL-FNGIN-  
ALNAY-NAALL-AKILK-VSVEE-FSPSI-AREIY (6-85)

Hydrophobic residue numbers: 6 7 12 15 18 20 21 29 31 36 37 40 42 47 49 50 51 54 56 57 59 62 63 64 65 66  
68 69 71 73 76 78 80 81 84

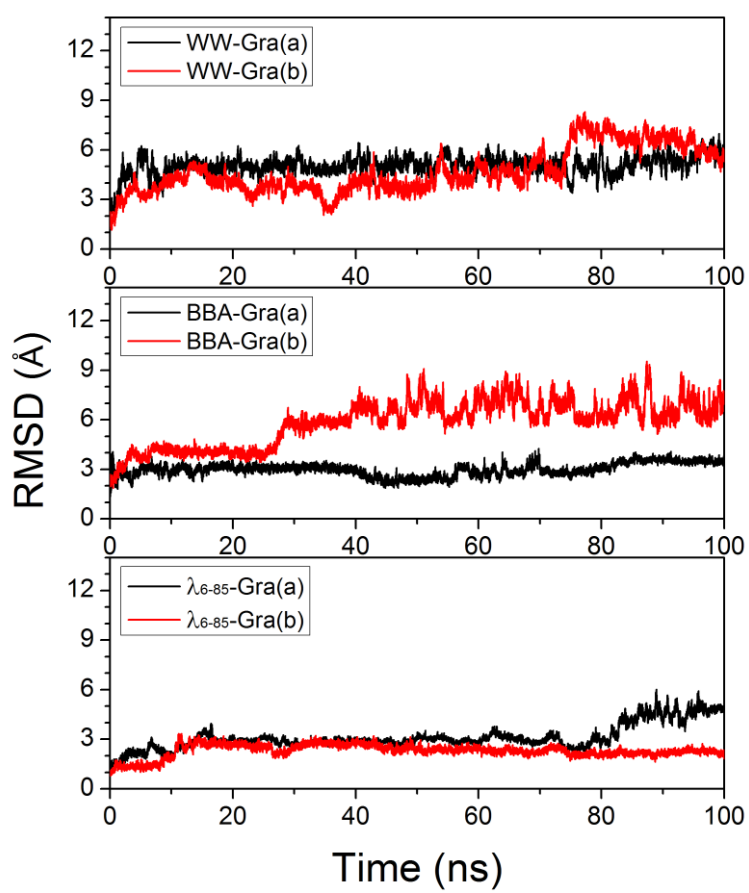
Aromatic residue numbers: 22 51 60 76 85



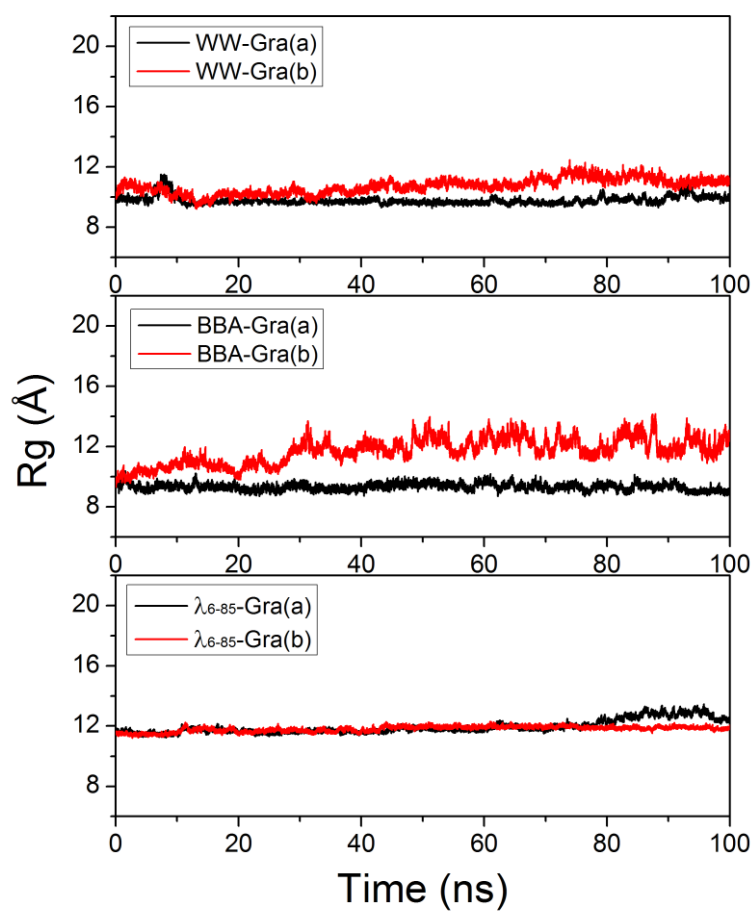
**Fig. S1.** Secondary structure contents as a function of time for all runs. For clarity, a windowed average over a period of 500 ps is shown. Helix contains  $\alpha$ -helix, pi-helix and  $3_{10}$ -helix, and sheet contains anti-parallel and parallel  $\beta$ -sheet.



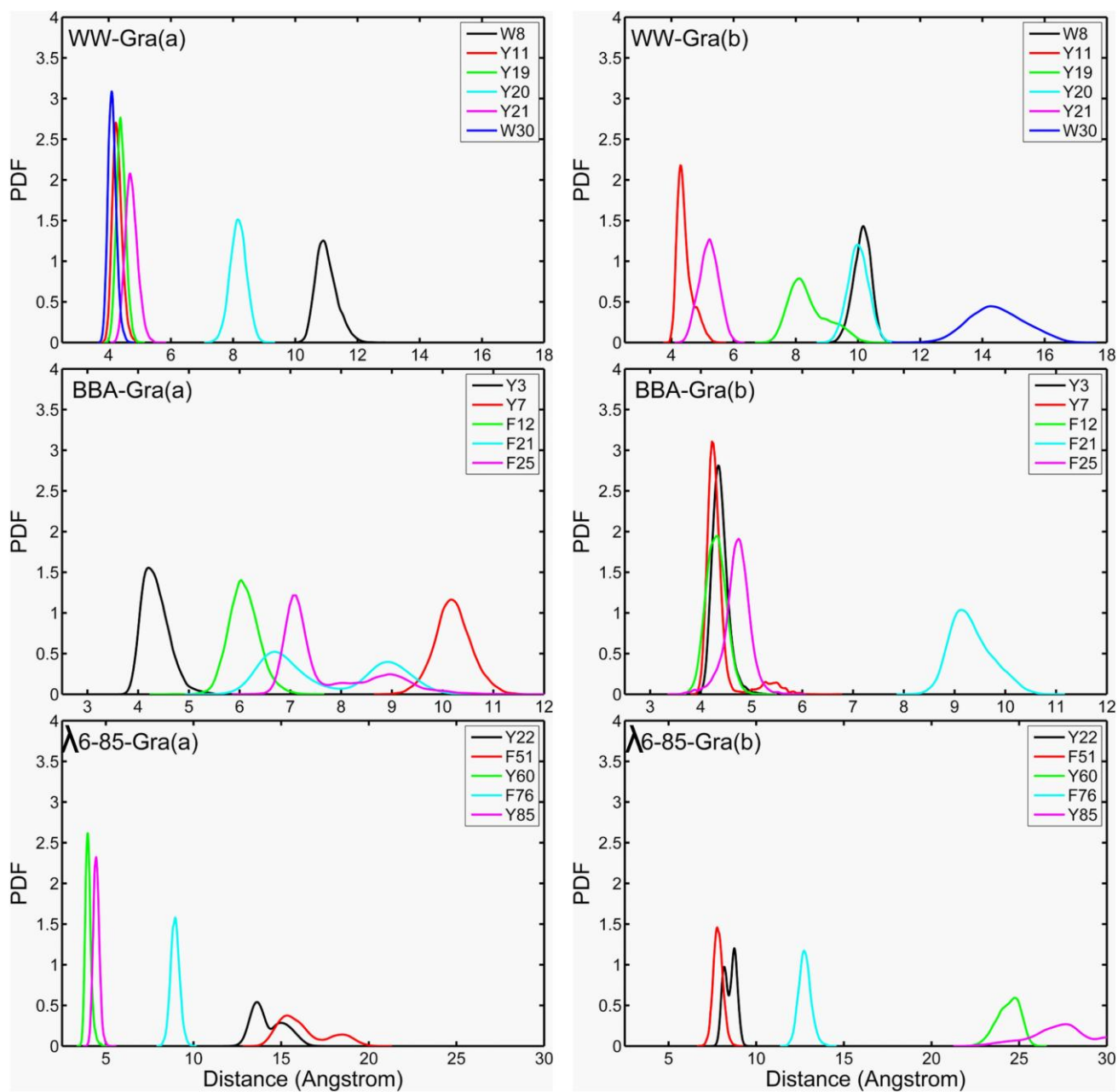
**Fig. S2.** Two different initial orientations of BBA protein. Aromatic residues are shown as sticks. Up: side view; down: top view.



**Fig. S3.** The RMSD of C $\alpha$  atoms as a function of simulation time.



**Fig. S4.** Radius of gyration as a function of simulation time for all systems.



**Fig. S5.** Probability distribution of the distance between the center of the side-chain aromatic ring and the graphene surface. Only the last 25 ns simulations are considered.

**Table S1.** The global contribution of the hydrophobic and aromatic residues, and the percentage of them from the total contribution of all protein residues.

Residues		WW-Gra (a)	WW-Gra (b)	BBA-Gra (a)	BBA-Gra (b)	$\lambda_{6-85}$ -Gra (a)	$\lambda_{6-85}$ -Gra (b)
Hydrophobic residues	kcal·mol <sup>-1</sup>	-16.58	-18.00	-4.56	-21.36	-33.71	-23.09
	%	32.32	38.14	9.61	26.36	44.57	36.05
Hydrophilic residues	kcal·mol <sup>-1</sup>	-34.72	-29.19	-42.89	-59.67	-41.93	-40.96
	%	67.68	61.86	90.39	73.64	55.43	63.95
Aromatic residues	kcal·mol <sup>-1</sup>	-29.14	-11.19	-11.00	-22.74	-13.84	-1.22
	%	56.80	23.71	23.18	28.06	18.30	1.90

**Table S2.** Decomposition of  $\Delta H$  ( $\text{kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$ ) of WW domain on a per residue basis into contributions from  $E_{\text{vdw}}$ ,  $G_{\text{sol\_polar}}$ , and  $G_{\text{sol\_np}}$ .

Residue	WW-Gra (a)					WW-Gra (b)				
	$\Delta E_{\text{vdw}}$	$\Delta G_{\text{sol\_polar}}$	$\Delta G_{\text{sol\_np}}$	$\Delta G_{\text{sol}}$	$\Delta H_{\text{tot}}$	$\Delta E_{\text{vdw}}$	$\Delta G_{\text{sol\_polar}}$	$\Delta G_{\text{sol\_np}}$	$\Delta G_{\text{sol}}$	$\Delta H_{\text{tot}}$
1	-0.01	0.08	0	0.08	0.08	-2.43	3.42	-0.38	3.04	0.61
2	-0.01	0.01	0	0.01	0	-3.38	0.77	-0.29	0.48	-2.9
3	-0.02	0.03	0	0.03	0.01	-4.47	1.2	-0.43	0.77	-3.7
4	-0.01	0.02	0	0.02	0.01	-3.59	1.04	-0.31	0.73	-2.85
5	-0.03	0.03	0	0.03	0	-4.74	0.6	-0.44	0.16	-4.58
6	-0.02	0.05	0	0.05	0.03	-1.71	0.6	-0.11	0.49	-1.22
7	-0.07	0.09	0	0.09	0.02	-0.52	0.18	0	0.18	-0.34
8	-0.2	0.07	0	0.07	-0.13	-0.44	0.15	0	0.15	-0.29
9	-0.54	0.25	0	0.25	-0.29	-3.12	1.07	-0.35	0.73	-2.39
10	-0.35	0.27	0	0.27	-0.08	-1.33	0.82	-0.1	0.72	-0.61
11	-7.69	1.67	-0.74	0.93	-6.76	-6.75	1.31	-0.63	0.69	-6.06
12	-1.54	0.86	-0.13	0.73	-0.8	-5.42	2.08	-0.61	1.48	-3.95
13	-3.62	0.63	-0.32	0.31	-3.3	-2.28	0.68	-0.14	0.54	-1.74
14	-2.62	0.45	-0.4	0.04	-2.58	-3.57	0.52	-0.56	-0.04	-3.61
15	-4.02	2.03	-0.39	1.64	-2.38	-0.58	0.32	0	0.31	-0.27
16	-0.18	0.09	0	0.09	-0.09	-0.41	0.17	-0.02	0.15	-0.26
17	-3.14	1.05	-0.3	0.76	-2.38	-0.21	0.12	0	0.12	-0.1
18	-0.4	0.13	0	0.13	-0.27	-0.17	0.09	0	0.09	-0.08
19	-7.41	1.43	-0.57	0.86	-6.54	-0.53	0.15	0	0.15	-0.38
20	-0.94	0.19	-0.01	0.17	-0.76	-0.28	0.1	0	0.1	-0.18
21	-6.83	1.19	-0.54	0.64	-6.19	-5.22	1.45	-0.49	0.96	-4.26
22	-0.4	0.07	0	0.07	-0.33	-0.46	0.11	0	0.11	-0.35
23	-0.97	0.53	-0.06	0.46	-0.5	-4.49	1.38	-0.47	0.91	-3.59
24	-0.18	0.17	0	0.17	-0.01	-0.56	0.29	0	0.28	-0.27
25	-0.34	0.15	0	0.15	-0.19	-0.19	0.07	0	0.07	-0.11
26	-5.21	0.74	-0.63	0.11	-5.09	-3.47	0.2	-0.47	-0.26	-3.74
27	-2	0.96	-0.13	0.83	-1.17	-0.24	0.22	0	0.22	-0.02
28	-3.13	0.86	-0.32	0.53	-2.59	-0.32	0.26	-0.01	0.25	-0.07
29	-0.66	0.18	0	0.18	-0.48	-0.08	0.03	0	0.03	-0.05
30	-9.36	1.43	-0.82	0.61	-8.76	-0.07	0.05	0	0.05	-0.02
31	-0.81	0.93	-0.05	0.87	0.06	-0.02	0.06	0	0.06	0.04
32	-0.18	0.23	0	0.22	0.05	-0.05	0.14	0	0.14	0.09
33	-0.05	0.04	0	0.04	-0.02	-0.01	0	0	0	-0.01
34	-0.14	0.12	0	0.12	-0.02	-0.01	0.02	0	0.02	0.01
35	-0.02	0.05	0	0.05	0.03	0	0	0	0	0
36	-0.04	0.03	0	0.03	-0.01	-0.01	0	0	0	0
37	-0.16	0.3	-0.01	0.29	0.13	-0.02	0.08	0	0.08	0.06



**Table S3.** Decomposition of  $\Delta H$  ( $\text{kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$ ) of BBA protein on a per residue basis into contributions from  $E_{\text{vdw}}$ ,  $G_{\text{sol\_polar}}$ , and  $G_{\text{sol\_np}}$ .

Residue	BBA-Gra (a)					BBA-Gra (b)				
	$\Delta E_{\text{vdw}}$	$\Delta G_{\text{sol\_polar}}$	$\Delta G_{\text{sol\_np}}$	$\Delta G_{\text{sol}}$	$\Delta H_{\text{tot}}$	$\Delta E_{\text{vdw}}$	$\Delta G_{\text{sol\_polar}}$	$\Delta G_{\text{sol\_np}}$	$\Delta G_{\text{sol}}$	$\Delta H_{\text{tot}}$
1	-0.36	0.95	0	0.95	0.59	-0.78	1.42	-0.03	1.39	0.62
2	-5.93	1.51	-0.6	0.91	-5.02	-5.72	1.83	-0.69	1.14	-4.58
3	-7.18	1.33	-0.7	0.63	-6.55	-7.39	1.49	-0.63	0.86	-6.53
4	-0.55	0.25	-0.01	0.24	-0.31	-0.58	0.33	-0.01	0.32	-0.26
5	-0.15	0.08	0	0.08	-0.07	-2.22	0.39	-0.32	0.07	-2.15
6	-0.96	0.81	-0.1	0.71	-0.25	-0.81	0.47	-0.03	0.44	-0.37
7	-0.25	0.14	0	0.14	-0.11	-7.71	1.59	-0.61	0.98	-6.73
8	-0.4	0.34	-0.01	0.34	-0.06	-5.77	2.18	-0.57	1.61	-4.16
9	-1.64	0.84	-0.23	0.61	-1.02	-1.64	0.45	-0.14	0.31	-1.33
10	-7.81	2.34	-0.65	1.7	-6.11	-2.29	0.9	-0.12	0.78	-1.51
11	-5.25	1.64	-0.53	1.11	-4.14	-3.64	0.79	-0.34	0.44	-3.19
12	-1.88	0.45	-0.08	0.37	-1.51	-6.3	1.53	-0.49	1.04	-5.26
13	-7.39	1.93	-0.78	1.15	-6.24	-7.74	2.54	-0.82	1.72	-6.01
14	-0.31	0.13	0	0.13	-0.18	-0.53	0.13	0	0.13	-0.4
15	-0.07	0.07	0	0.07	0	-2.16	1.12	-0.23	0.89	-1.28
16	-0.07	0.11	0	0.11	0.03	-0.22	0.21	0	0.21	-0.02
17	-0.74	1.05	-0.09	0.97	0.22	-0.36	0.25	0	0.25	-0.12
18	-0.15	0.04	0	0.04	-0.11	-5.18	0.94	-0.46	0.48	-4.7
19	-0.05	0.07	0	0.07	0.02	-6.92	2.11	-0.74	1.37	-5.55
20	-0.13	0.26	0	0.26	0.13	-0.55	0.25	-0.01	0.24	-0.3
21	-2.17	0.31	-0.37	-0.05	-2.23	-0.34	0.14	0	0.14	-0.21
22	-0.08	0.04	0	0.04	-0.04	-5.17	0.56	-0.41	0.14	-5.03
23	-0.08	0.17	0	0.17	0.09	-5.54	2.17	-0.6	1.57	-3.97
24	-0.73	0.56	-0.03	0.53	-0.2	-0.87	0.42	0	0.42	-0.45
25	-0.84	0.24	0	0.24	-0.6	-4.8	1.19	-0.41	0.79	-4.01
26	-5.76	1.7	-0.65	1.05	-4.71	-5.96	2.21	-0.57	1.64	-4.32
27	-3.16	0.97	-0.29	0.68	-2.48	-3.51	1.37	-0.35	1.01	-2.5
28	-8.74	3.1	-0.95	2.15	-6.59	-9.09	3.14	-0.77	2.38	-6.71

**Table S4.** Decomposition of  $\Delta H$  ( $\text{kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$ ) of  $\lambda_{6-85}$  on a per residue basis into contributions from

$E_{vdw}$ ,  $G_{sol\_polar}$ , and  $G_{sol\_np}$ .

Residue	$\lambda_{6-85}$ -Gra (a)					$\lambda_{6-85}$ -Gra (b)				
	$\Delta E_{vdw}$	$\Delta G_{sol\_polar}$	$\Delta G_{sol\_np}$	$\Delta G_{sol}$	$\Delta H_{tot}$	$\Delta E_{vdw}$	$\Delta G_{sol\_polar}$	$\Delta G_{sol\_np}$	$\Delta G_{sol}$	$\Delta H_{tot}$
6	-0.08	0.13	0	0.13	0.06	-3.18	1.26	-0.43	0.83	-2.36
7	-0.02	0.01	0	0.01	-0.02	-5.26	1.12	-0.5	0.62	-4.64
8	-0.01	0.01	0	0.01	0	-2.62	0.58	-0.16	0.42	-2.2
9	-0.01	0.02	0	0.02	0	-5.5	1.3	-0.58	0.72	-4.78
10	-0.01	0.05	0	0.05	0.04	-0.41	0.29	0	0.29	-0.13
11	-0.01	0.02	0	0.02	0.01	-0.43	0.36	0	0.36	-0.08
12	0	0	0	0	0	-4.54	0.45	-0.41	0.04	-4.5
13	-0.01	0.01	0	0.01	0.01	-0.6	0.27	0	0.27	-0.32
14	-0.02	0.06	0	0.06	0.04	-0.27	0.07	0	0.07	-0.21
15	-0.01	0.01	0	0.01	0	-2.62	0.91	-0.26	0.65	-1.96
16	-0.01	0.01	0	0.01	0	-8.86	2.94	-0.88	2.07	-6.79
17	-0.04	0.07	0	0.07	0.03	-0.97	0.4	0	0.4	-0.56
18	-0.04	0.02	0	0.02	-0.02	-0.46	0.18	0	0.18	-0.27
19	-0.01	0.02	0	0.02	0	-6.46	2.77	-0.51	2.26	-4.2
20	-0.01	0.02	0	0.02	0.01	-3.56	0.38	-0.38	0	-3.56
21	-0.09	0.03	0	0.03	-0.07	-0.57	0.09	0	0.09	-0.48
22	-0.06	0.01	0	0.01	-0.05	-0.48	0.16	0	0.16	-0.32
23	-0.03	0.03	0	0.03	0	-5.68	1.97	-0.4	1.56	-4.11
24	-0.12	0.21	0	0.21	0.1	-6.22	1.97	-0.69	1.28	-4.94
25	-0.59	0.87	-0.06	0.81	0.22	-0.54	0.33	0	0.33	-0.21
26	-0.08	0.07	0	0.07	0	-3.98	1.87	-0.47	1.4	-2.58
27	-0.07	0.09	0	0.09	0.02	-4.14	1.35	-0.61	0.74	-3.4
28	-0.94	0.91	-0.09	0.82	-0.12	-0.51	0.48	-0.02	0.46	-0.05
29	-2.65	0.2	-0.44	-0.24	-2.89	-0.1	0.07	0	0.07	-0.02
30	-0.06	0.04	0	0.04	-0.02	-0.08	0.09	0	0.09	0.01
31	-0.2	0.07	0	0.06	-0.14	-0.22	0.1	0	0.1	-0.12
32	-0.02	0.01	0	0.01	-0.01	-0.19	0.18	0	0.18	-0.01
33	-0.02	0.03	0	0.03	0.01	-2.07	1.02	-0.28	0.73	-1.33
34	-0.03	0.05	0	0.05	0.03	-0.45	0.7	-0.03	0.67	0.22
35	-0.07	0.05	0	0.05	-0.02	-0.05	0.07	0	0.07	0.02
36	-0.1	0.03	0	0.03	-0.07	-0.04	0.03	0	0.03	-0.01
37	-0.06	-0.02	0	-0.02	-0.08	-0.02	0.01	0	0.01	-0.01
38	-0.42	0.57	-0.01	0.56	0.14	-0.01	0.02	0	0.02	0.01
39	-2.15	1.19	-0.32	0.87	-1.28	-0.01	0.04	0	0.04	0.02
40	-0.6	0.02	0	0.02	-0.58	-0.03	0.02	0	0.02	-0.01
41	-0.29	0.1	0	0.09	-0.2	0	0.01	0	0.01	0.01
42	-0.16	0.05	0	0.05	-0.12	-0.03	0.02	0	0.02	-0.01
43	-0.02	0.01	0	0.01	-0.01	-0.02	0.01	0	0.01	0
44	-0.02	0.03	0	0.03	0.01	-0.1	0.13	0	0.13	0.02

Residue	$\lambda_{6-85}$ -Gra (a)					$\lambda_{6-85}$ -Gra (b)				
	$\Delta E_{vdw}$	$\Delta G_{sol\_polar}$	$\Delta G_{sol\_np}$	$\Delta G_{sol}$	$\Delta H_{tot}$	$\Delta E_{vdw}$	$\Delta G_{sol\_polar}$	$\Delta G_{sol\_np}$	$\Delta G_{sol}$	$\Delta H_{tot}$
45	-0.01	0.02	0	0.02	0.01	-0.13	0.14	0	0.14	0.01
46	-0.01	0.02	0	0.02	0.01	-0.05	0	0	0	-0.05
47	-0.04	0.02	0	0.02	-0.02	-0.1	0.03	0	0.03	-0.07
48	-0.01	0.01	0	0.01	0	-0.28	0.07	0	0.07	-0.21
49	-0.01	0.02	0	0.02	0	-0.33	0.01	0	0.01	-0.32
50	-0.09	0.05	0	0.05	-0.04	-0.21	0.09	0	0.09	-0.12
51	-0.04	0.02	0	0.02	-0.02	-1.08	0.27	-0.02	0.24	-0.84
52	-0.01	0.03	0	0.03	0.02	-6.11	2.33	-0.65	1.68	-4.42
53	-0.01	0.04	0	0.04	0.02	-0.84	0.22	-0.02	0.21	-0.64
54	-0.02	0.03	0	0.03	0.01	-3.45	0.16	-0.34	-0.18	-3.63
55	-0.06	0.12	0	0.12	0.06	-0.14	0.15	0	0.15	0.01
56	-0.09	0.12	0	0.12	0.03	-0.03	0.03	0	0.03	-0.01
57	-0.78	0.26	-0.05	0.21	-0.57	-0.03	0.02	0	0.02	-0.01
58	-3.84	1.34	-0.41	0.93	-2.91	-0.01	0.01	0	0.01	0
59	-0.42	0.09	0	0.09	-0.32	0	0	0	0	0
60	-8.1	1.64	-0.6	1.04	-7.06	0	0	0	0	0
61	-4.88	1.31	-0.37	0.94	-3.94	-0.01	0.02	0	0.02	0.01
62	-0.57	0.21	0	0.2	-0.37	-0.01	0	0	0	0
63	-2.71	0.43	-0.23	0.2	-2.51	0	0	0	0	0
64	-3.86	0.3	-0.32	-0.02	-3.88	-0.01	0.01	0	0.01	0
65	-0.45	0.02	0	0.02	-0.43	-0.03	0.03	0	0.03	0
66	-3.23	0.44	-0.25	0.19	-3.04	-0.01	0	0	0	-0.01
67	-7.26	3.52	-0.75	2.77	-4.49	-0.01	0.01	0	0.01	0.01
68	-0.71	0.18	0	0.18	-0.52	-0.02	0.03	0	0.03	0.01
69	-0.5	0.21	0	0.21	-0.29	-0.06	0.03	0	0.03	-0.03
70	-7.06	3.12	-0.7	2.42	-4.64	-0.02	0.04	0	0.04	0.02
71	-3.56	0.77	-0.18	0.59	-2.97	-0.03	0.02	0	0.02	-0.01
72	-4.11	0.78	-0.42	0.36	-3.75	-0.01	0.02	0	0.02	0.01
73	-3.93	0.24	-0.3	-0.06	-3.99	-0.01	0.01	0	0.01	-0.01
74	-1.53	1.2	-0.14	1.06	-0.47	-0.03	0.06	0	0.06	0.03
75	-0.33	0.39	0	0.39	0.06	-0.1	0.23	0	0.23	0.13
76	-0.49	0.02	0	0.02	-0.47	-0.09	0.03	0	0.03	-0.06
77	-0.17	0.16	0	0.16	-0.02	-0.03	0.03	0	0.03	0
78	-0.11	0.06	0	0.06	-0.05	-0.04	0.01	0	0.01	-0.03
79	-0.26	0.16	0	0.16	-0.1	-0.02	0.04	0	0.04	0.02
80	-4.61	0.8	-0.34	0.47	-4.14	-0.01	0.01	0	0.01	0
81	-3.8	1.03	-0.35	0.68	-3.12	-0.01	0.01	0	0.01	0
82	-8.53	2.87	-0.84	2.03	-6.51	-0.01	0.01	0	0.01	0.01
83	-1.49	0.62	-0.07	0.56	-0.93	0	0.01	0	0.01	0.01
84	-3.04	0.23	-0.27	-0.04	-3.08	0	0	0	0	0
85	-7.96	2.52	-0.79	1.72	-6.24	0	0	0	0	0