

Monomer 1	Monomer 2	Distance, Å
Leu <sup>108</sup>	Arg <sup>127</sup> , Leu <sup>134</sup> , Leu <sup>137</sup>	3.63, 3.68, 3.70
Tyr <sup>110</sup>	Arg <sup>127</sup>	3.66
Asp <sup>118</sup>	Arg <sup>127</sup> (NH2*)	2.58
Ile <sup>120</sup>	Ile <sup>120</sup> , Ile <sup>123</sup> , Ser <sup>124</sup> , Arg <sup>127</sup>	3.99, 3.79, 3.56, 3.57
Ile <sup>123</sup>	Ile <sup>120</sup>	3.79
Ser <sup>124</sup>	Ile <sup>120</sup> , Ser <sup>124</sup> (OG*)	3.56, 2.62
Arg <sup>127</sup>	Leu <sup>108</sup> , Tyr <sup>110</sup> , Asp <sup>118</sup> (OD2*), Ile <sup>120</sup>	3.63, 3.66, 2.58, 3.57
Leu <sup>134</sup>	Leu <sup>108</sup>	3.68
Asn <sup>136</sup>	Phe <sup>151</sup> , Phe <sup>152</sup>	3.23, 3.35
Leu <sup>137</sup>	Leu <sup>108</sup> , His <sup>156</sup> (NE2*)	3.70, 2.88
Ile <sup>139</sup>	Ile <sup>139</sup> , His <sup>156</sup>	3.78, 3.63
Asn <sup>141</sup>	Val <sup>207</sup>	3.63
Ala <sup>148</sup>	Leu <sup>172</sup> , Asn <sup>203</sup> (ND2*)	3.16, 2.82
Gln <sup>149</sup>	Phe <sup>170</sup> , Leu <sup>172</sup> , Arg <sup>176</sup> (NH2*)	3.57, 3.62, 3.02
Arg <sup>150</sup>	Trp <sup>161</sup> , Lys <sup>166</sup> , Tyr <sup>168</sup> (OH*), Phe <sup>170</sup>	3.86, 3.44, 2.66, 3.65
Phe <sup>151</sup>	Asn <sup>136</sup> , Trp <sup>161</sup> , Phe <sup>170</sup> , Asn <sup>203</sup> (ND2*)	3.23, 3.85, 3.25, 2.98
Phe <sup>152</sup>	Asn <sup>136</sup> (OD1*), Trp <sup>161</sup> , Phe <sup>170</sup> , Asn <sup>203</sup> , Pro <sup>204</sup> , Thr <sup>205</sup> , Asn <sup>206</sup> , Trp <sup>208</sup> , Ala <sup>238</sup>	2.88, 3.99, 3.80, 3.46, 3.70, 3.40, 3.65, 3.70, 3.92
Ala <sup>153</sup>	Asn <sup>203</sup> (OD1*), Thr <sup>205</sup> , Asn <sup>206</sup> (N*)	3.04, 3.17, 2.91
Asn <sup>154</sup>	Asn <sup>206</sup> (ND2*)	2.93
Arg <sup>155</sup>	Thr <sup>205</sup> , Asn <sup>206</sup> (OD1*), Val <sup>207</sup>	3.69, 2.91, 3.92
His <sup>156</sup>	Leu <sup>137</sup> (O*), Ile <sup>139</sup> , Asn <sup>156</sup> , Val <sup>207</sup>	2.88, 3.63, 3.18, 3.74
Trp <sup>161</sup>	Arg <sup>150</sup> , Phe <sup>151</sup> , Phe <sup>152</sup>	3.86, 3.85, 3.99
Lys <sup>166</sup>	Arg <sup>150</sup>	3.44
Tyr <sup>168</sup>	Arg <sup>150</sup> (O*)	2.66
Phe <sup>170</sup>	Gln <sup>149</sup> , Arg <sup>150</sup> , Phe <sup>151</sup> , Phe <sup>152</sup>	3.57, 3.42, 3.24, 3.80
Leu <sup>172</sup>	Ala <sup>148</sup> , Gln <sup>149</sup>	3.16, 3.62
Arg <sup>176</sup>	Gln <sup>149</sup> (OE1*)	3.02
Asn <sup>203</sup>	Ala <sup>148</sup> (O*), Phe <sup>151</sup> (O*), Phe <sup>152</sup> , Ala <sup>153</sup> (N*)	2.82, 2.98, 3.46, 3.04
Pro <sup>204</sup>	Phe <sup>152</sup>	3.70
Thr <sup>205</sup>	Phe <sup>152</sup> , Ala <sup>153</sup> , Arg <sup>155</sup>	3.40, 3.17, 3.69
Asn <sup>206</sup>	Phe <sup>152</sup> , Ala <sup>153</sup> (O*), Asn <sup>154</sup> (OD1*), Arg <sup>155</sup> (N*), His <sup>156</sup>	3.64, 2.91, 2.93, 2.91, 3.18
Val <sup>207</sup>	Asn <sup>141</sup> , Arg <sup>155</sup> , His <sup>156</sup>	3.63, 3.92, 3.74
Trp <sup>208</sup>	Phe <sup>152</sup>	3.70
Ala <sup>238</sup>	Phe <sup>152</sup>	3.92

Supplemental Table 1: Dimer Interface Contacts in M.RsrI. Contacts within 4.0 Å were determined using CCP4 (1) and O (2). Interactions including hydrogen bonds within 3.2 Å and 100° are marked with a \*.

---

**References:**

1. COLLABORATIVE COMPUTATIONAL PROJECT, NUMBER 4. (1994) The CCP4 Suite: Programs for Protein Crystallography. *Acta Cryst.*, **D50**, 760-763.
2. Jones, T.A., Cowan, S., Zou, J.-Y. & Kjeldgaard, M. (1991). Improved Methods for Building Protein Models in Electron Density Maps and the Location of Errors in these Models. *Acta Cryst.* **A47**, pp. 110—119.