

SUPPORTING INFORMATION

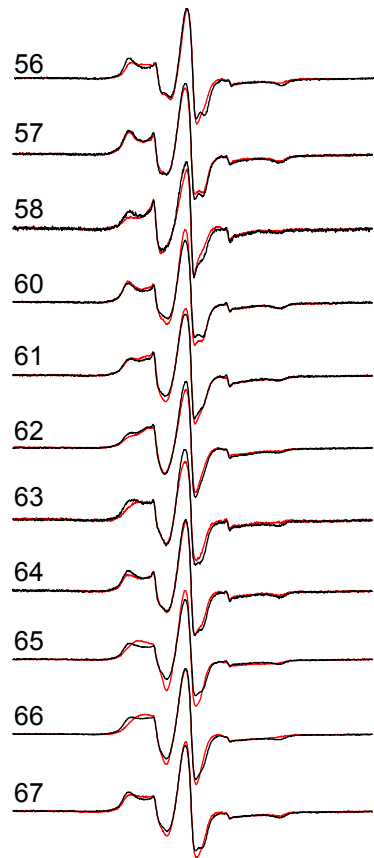
Structure and pH-Induced Structural Rearrangements of the Putative Multidrug Efflux Pump EmrD in Liposomes Probed by Site-directed Spin Labeling

P. Ryan Steed, Ping Zou, Kristin E. Trone, and Hassane Mchaourab

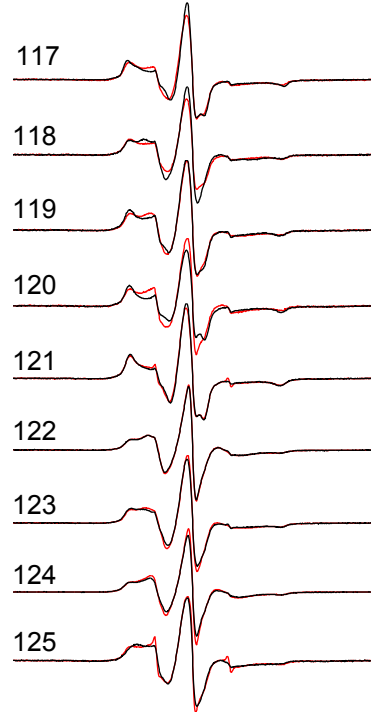
Following page:

FIGURE S1: CW-EPR spectra of spin-labeled positions at pH 5 and pH 7. Spectra of spin-labeled, reconstituted EmrD at pH 7 (black) and pH 5 (red) are grouped according to location of the labeled position. All spectra have a scan width of 160 G, and amplitude has been normalized to the double integral.

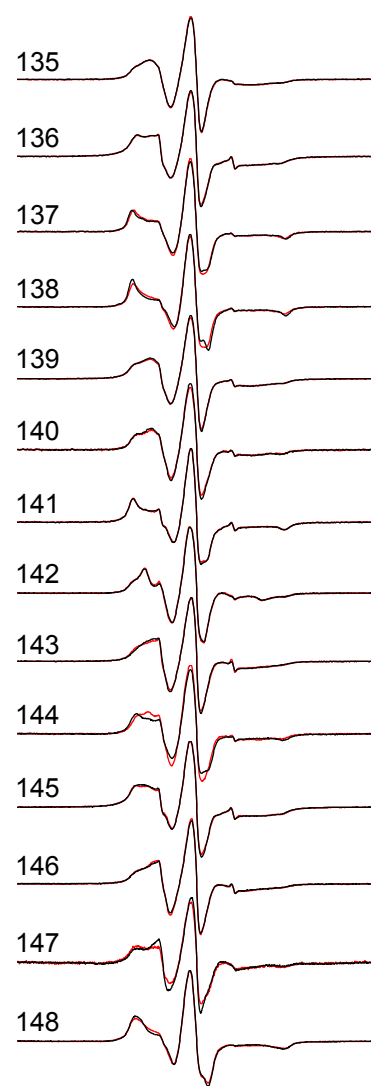
TM 2



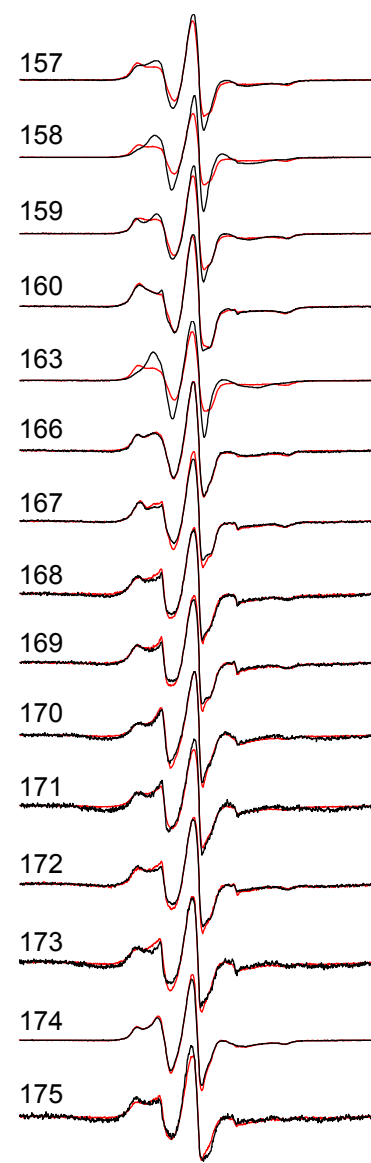
TM 4



TM 5



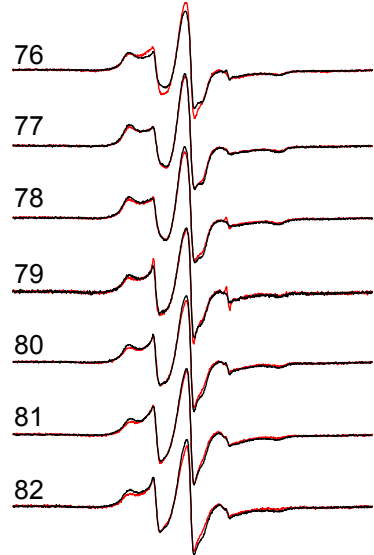
TM 6



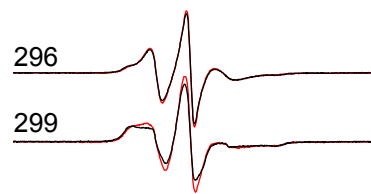
TM 8



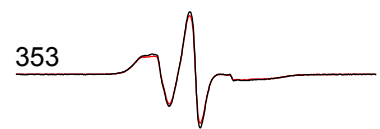
TM 3



TM 10



TM 11 - TM12 Loop



— pH 7
— pH 5

TABLE S1: Mobility and Accessibility Parameters*

Position	pH 5			pH 7			Position	pH 5			pH 7		
	ΔH_0^{-1}	Π		ΔH_0^{-1}	Π			ΔH_0^{-1}	Π		ΔH_0^{-1}	Π	
		NiEDDA	O ₂		NiEDDA	O ₂			NiEDDA	O ₂		NiEDDA	O ₂
TM 2							TM 6						
56	0.23	0.14	0.26	0.13	0.07	0.12	157	0.19	0.22	0.40	0.21	0.76	0.58
57	0.13	0.12	0.21	0.13	0.08	0.19	158	0.20	0.27	0.48	0.26	1.15	0.80
58	0.31	0.63	0.86	0.27	0.49	0.55	159	0.19	0.23	0.40	0.22	0.83	0.56
60	0.13	0.12	0.18	0.12	0.12	0.15	160	0.13	0.09	0.25	0.13	0.26	0.20
61	0.22	0.34	0.67	0.22	0.35	0.46	163	0.15	0.12	0.31	0.19	0.34	0.75
62	0.23	0.23	0.79	0.22	0.32	0.55	166	0.21	0.20	0.80	0.20	0.22	0.56
63	0.20	0.26	0.65	0.20	0.26	0.33	167	0.23	0.20	0.77	0.23	0.26	0.51
64	0.23	0.86	0.34	0.22	0.58	0.30	168	0.24	0.47	0.58	0.21	0.38	0.34
65	0.21	0.21	0.61	0.20	0.25	0.35	169	0.24	0.25	0.65	0.22	0.35	0.33
66	0.20	0.25	0.65	0.20	0.23	0.34	170	0.26	0.39	0.99	0.26	0.17	0.73
67	0.21	0.74	0.32	0.22	0.38	0.31	171	0.23	0.43	0.56	0.21	0.39	0.33
TM 3							172	0.24	0.34	0.63	0.21	0.29	0.31
76	0.22	0.44	0.41	0.21	0.26	0.34	173	0.23	0.32	0.79	0.25	0.36	0.45
77	0.21	0.37	0.49	0.21	0.18	0.43	174	0.23	0.08	1.10	0.23	0.06	0.78
78	0.21	0.24	0.44	0.21	0.21	0.40	175	0.24	0.33	0.71	0.21	0.30	0.32
80	0.24	0.58	0.61	0.26	0.37	0.60	TM 8						
81	0.26	0.58	0.78	0.24	0.28	0.66	242	0.12	0.08	0.20	0.11	0.03	0.10
82	0.26	0.58	0.66	0.24	0.40	0.43	243	0.22	0.46	0.94	0.23	0.35	0.81
TM 4							244	0.21	0.74	0.70	0.21	0.75	0.55
117	0.13	0.16	0.08	0.13	0.14	0.15	245	0.13	0.08	0.19	0.13	0.09	0.02
118	0.13	0.31	0.22	0.21	0.15	0.16	246	0.12	0.06	0.18	0.12	0.05	0.10
119	0.21	0.41	0.37	0.20	0.26	0.20	249	0.13	0.05	0.17	0.20	0.17	0.29
120	0.24	0.54	0.32	0.12	0.03	0.07	253	0.13	0.07	0.07	0.13	0.01	0.06
121	0.13	0.06	0.14	0.13	0.04	0.08	254	0.24	0.63	0.63	0.24	0.38	0.47
122	0.30	2.14	0.43	0.29	2.70	0.40	255	0.22	0.40	0.61	0.23	0.30	0.43
123	0.23	0.80	0.38	0.22	0.67	0.29	256	0.23	0.13	0.18	0.23	0.16	0.23
124	0.28	3.39	0.44	0.26	3.35	0.38	257	0.18	0.18	0.35	0.19	0.32	0.64
125	0.22	0.58	0.39	0.22	0.93	0.27	258	0.20	0.10	1.23	0.21	0.13	0.82
TM 5							260	0.16	0.17	0.30	0.16	0.19	0.22
135	0.21	0.41	0.39	0.23	0.55	0.45	261	0.21	0.31	0.48	0.21	0.31	0.42
136	0.20	0.31	0.41	0.18	0.45	0.30	262	0.13	0.11	0.36	0.14	0.06	0.43
137	0.14	0.07	0.10	0.17	0.14	0.11	264	0.22	0.74	0.39	0.24	1.45	0.42
138	0.20	0.12	0.21	0.12	0.03	0.08	265	0.22	0.48	0.48	0.22	0.37	0.37
139	0.21	0.43	0.52	0.21	0.46	0.56	TM 10, 11-12 Loop						
140	0.20	0.10	0.57	0.20	0.04	0.65	296	0.26	1.05	0.94	0.26	0.93	0.79
141	0.22	0.18	0.19	0.22	0.16	0.18	299	0.20	0.46	0.68	0.20	0.31	0.52
142	0.16	0.06	0.09	0.17	0.06	0.08	353	0.22	0.23	0.77	0.23	0.36	0.61
143	0.23	0.21	0.58	0.22	-0.01	0.53	* Mobility (ΔH_0^{-1}) and accessibility (Π) parameters are calculated as described in Refs. 27 and 28, respectively.						
144	0.20	0.08	0.68	0.21	0.07	0.35							
145	0.18	0.13	0.18	0.18	0.14	0.17							
146	0.23	0.19	0.82	0.21	0.16	0.53							
147	0.23	0.27	0.37	0.24	0.21	0.48							
148	0.12	0.09	0.17	0.13	0.05	0.23							