

Table S1. Ca²⁺ and Mg²⁺ coordination in the Gla domains of FVIIa and APC

The Ca²⁺/Mg²⁺ concentration and the ω-loop ligand binding influence the metal ion selectivity and the coordination geometry in the Gla domains.

Metal	d-FFR-FVIIa/sTF (Ca Only) ^a 1DAN		dEGR-FVIIa/sTF (Mg2.5/Ca5) 3TH2		dEGR-VIIa/sTF (Mg5/Ca45) 3TH4		APC-Gla/EPCR (Mg5/Ca5) 3JTC	
Ca1/Mg1	O _{ε1} Gla25	2.95 Å	O _{ε3} Gla25	2.10 Å	O _{ε1} Gla25	1.84 Å	O _{ε2} Gla25	2.08 Å
	O _{ε3} Gla25	2.48 Å	O _{ε2} Gla25	2.12 Å	O _{ε3} Gla25	2.09 Å	O _{ε4} Gla25	2.07 Å
	O _{ε1} Gla29	2.44 Å	O _{ε1} Gla29	2.10 Å	O _{ε1} Gla29	2.13 Å	O _{ε1} Gla29	2.04 Å
	O _{ε3} Gla29	3.11 Å	O _{ε3} Gla29	1.94 Å	O _{ε3} Gla29	2.11 Å	O _{ε4} Gla29	2.03 Å
			H ₂ O 635	2.11 Å	H ₂ O 297	1.90 Å	O _{ε1} Glu86	2.05 Å
			H ₂ O 424	2.04 Å	H ₂ O 325	2.12 Å	H ₂ O 615	2.10 Å
Ca2	O _{ε2} Gla26	2.38 Å	O _{ε1} Gla29	2.96 Å	O _{ε2} Gla7	2.38 Å	O _{ε4} Gla29	2.47 Å
	O _{ε3} Gla29	2.28 Å	O _{ε2} Gla29	2.55 Å	O _{ε4} Gla7	2.24 Å	O _{ε2} Gla29	2.58 Å
	O _{ε4} Gla29	2.56 Å	O _{ε3} Gla26	2.58 Å	O _{ε2} Gla26	2.52 Å	O _{ε1} Gla26	2.35 Å
	O _{ε4} Gla7	2.35 Å	H ₂ O 267	2.27 Å	O _{ε3} Gla29	2.25 Å	O _{ε2} Gla7	2.31 Å
	O _{ε2} Gla7	2.39 Å	H ₂ O 428	2.27 Å	O _{ε4} Gla29	2.31 Å	O _{ε4} Gla7	2.37 Å
	H ₂ O 241	2.65 Å	H ₂ O 563	2.04 Å	H ₂ O 311	2.26 Å	O _{ε1} Glu86	2.33 Å
	H ₂ O 242	2.50 Å			H ₂ O 326	2.66 Å	H ₂ O 47	2.32 Å
Ca3	O _{ε3} Gla16	2.54 Å	O _{ε3} Gla26	3.50 Å	O _{ε4} Gla29	2.59 Å	O _{ε1} Gla7	2.67 Å
	O _{ε4} Gla29	2.57 Å	O _{ε4} Gla26	3.02 Å	O _{ε1} Gla26	2.38 Å	O _{ε3} Gla7	2.47 Å
	O _{ε1} Gla26	2.46 Å	O _{ε3} Gla16	3.37 Å	O _{ε2} Gla7	2.44 Å	O _{ε1} Gla16	2.58 Å
	O _{ε1} Gla7	2.68 Å	O _{ε2} Gla29	2.56 Å	O _{ε3} Gla16	2.66 Å	O _{ε2} Gla26	2.44 Å
	O _{ε2} Gla7	2.53 Å	H ₂ O 639	2.26 Å	O _{ε1} Gla7	2.66 Å	O _{ε3} Gla29	2.55 Å
	H ₂ O 188	2.57 Å	H ₂ O 564	2.88 Å	H ₂ O 84	2.23 Å	H ₂ O 56	2.44 Å
	H ₂ O 189	2.51 Å	H ₂ O 267	2.36 Å	H ₂ O 139	2.64 Å	H ₂ O 57	2.48 Å
	H ₂ O 190	2.61 Å	H ₂ O 490	2.77 Å	H ₂ O 191	2.33 Å	H ₂ O 74	2.34 Å
Ca4/Mg4	O _{ε1} Gla16	2.27 Å	O _{ε1} Gla16	1.86 Å	O _{ε4} Gla26	2.44 Å	O _{ε2} Gla6	2.64 Å
	O _{ε3} Gla16	2.38 Å	O _{ε3} Gla16	2.05 Å	O _{ε1} Gla26	2.56 Å	O _{ε1} Gla7	2.33 Å
	O _{ε1} Gla26	2.49 Å	O _{ε4} Gla26	1.98 Å	O _{δ1} Asn2	2.44 Å	O _{ε1} Gla16	2.46 Å
	O _{ε4} Gla26	2.64 Å	O _{ε1} Gla26	1.91 Å	O _{ε1} Gla16	2.31 Å	O _{ε3} Gla16	2.37 Å
	O _{δ1} Asn2	2.34 Å	H ₂ O 638	1.82 Å	O _{ε1} Gla6	2.50 Å	O _{ε2} Gla26	2.64 Å
	O _{ε1} Gla7	2.36 Å	H ₂ O 397	2.11 Å	O _{ε1} Gla7	2.40 Å	O _{ε4} Gla26	2.39 Å
	O _{ε1} Gla6	2.56 Å			O _{ε3} Gla16	2.34 Å	O _{δ1} Asn2	2.31 Å
					O Ala1	3.19 Å	O Ala1	2.97 Å
Ca5	O ALA1	2.37 Å	O _{ε1} Gla16	2.18 Å	O _{ε3} Gla20	2.61 Å	O _{ε3} Gla16	2.45 Å
	O _{ε3} Gla16	2.49 Å	O _{ε2} Gla16	2.42 Å	O _{ε4} Gla20	2.47 Å	O _{ε4} Gla16	2.50 Å
	O _{ε4} Gla16	2.41 Å	O _{ε3} Gla20	2.82 Å	O _{ε4} Gla6	2.34 Å	O _{ε2} Gla6	2.48 Å
	O _{ε4} Gla20	2.71 Å	O Ala1	3.21 Å	O _{ε1} Gla6	2.47 Å	O _{ε3} Gla20	2.37 Å
	O _{ε1} Gla20	2.63 Å	H ₂ O 565	2.87 Å	O Ala1	2.40 Å	O _{ε4} Gla20	2.56 Å
	O _{ε2} Gla6	2.61 Å	H ₂ O 568	2.44 Å	O _{ε2} Gla16	2.53 Å	O _{ε4} Gla6	2.34 Å
	O _{ε1} Gla6	2.69 Å			O _{ε1} Gla16	2.54 Å	O Ala1	2.39 Å
	H ₂ O 186	2.51 Å			H ₂ O 197	2.38 Å	H ₂ O 59	2.45 Å
Ca6	O _{ε1} Gla20	2.48 Å	O _{ε2} Gla20	2.55 Å	O _{ε1} Gla20	2.54 Å	O _{ε1} Gla20	2.46 Å
	O _{ε3} Gla20	2.62 Å	O _{ε3} Gla20	2.11 Å	O _{ε3} Gla20	2.55 Å	O _{ε4} Gla20	2.21 Å
			H ₂ O 568	2.81 Å	H ₂ O 218	2.30 Å	H ₂ O 63	2.31 Å
			H ₂ O 570	2.38 Å	H ₂ O 328	2.37 Å	H ₂ O 66	1.99 Å
					H ₂ O 327	2.45 Å	H ₂ O 79	2.19 Å
					H ₂ O 329	2.36 Å	H ₂ O 80	2.15 Å
Ca7/Mg7	O _{ε2} Gla14	2.71 Å	O _{ε4} Gla14	2.09 Å	O _{ε2} Gla19	2.09 Å	O _{ε1} Gla19	2.22 Å
	O _{ε3} Gla14	2.39 Å	O _{ε1} Gla14	2.02 Å	O _{ε3} Gla19	2.02 Å	O _{ε4} Gla19	2.00 Å
	O _{ε2} Gla19	2.28 Å	O _{ε2} Gla19	1.93 Å	O _{ε2} Gla14	1.73 Å	O _{ε3} Gla14	2.08 Å
	O _{ε3} Gla19	2.70 Å	O _{ε4} Gla19	2.11 Å	O _{ε3} Gla14	2.10 Å	O _{ε1} Gla14	2.14 Å
	H ₂ O 243	2.79 Å	H ₂ O 649	2.10 Å	H ₂ O 330	2.23 Å	H ₂ O 67	2.19 Å
					H ₂ O 331	1.97 Å	H ₂ O 99	2.26 Å

^aCa Only, 10 mM Ca²⁺; Mg5/Ca45, 5 mM Mg²⁺/45 mM Ca²⁺; Mg2.5/Ca5, 2.5 mM Mg²⁺/5 mM Ca²⁺; Mg5/Ca5, 5 mM Mg²⁺/5 mM Ca²⁺.