

Supporting Material

CHARMM-GUI *Membrane Builder* Toward Realistic Biological Membrane Simulations

Emilia L. Wu, Xi Cheng, Sunhwan Jo, Huan Rui, Kevin C. Song, Eder M. Dávila-Contreras, Yifei Qi, Jumin Lee, Viviana Monje-Galvan, Richard M. Venable, Jeffery B. Klauda, and Wonpil Im

Table S1. List of lipid molecules available in *Membrane Builder* with corresponding lipid information.

Lipid Class	Lipid Name	Tail Info
Sterols	CHL1	
	ERG	
PA Lipids (phosphatidic acid)	DLPA	12:0 / 12:0
	DMPA	14:0 / 14:0
	DPPA	16:0 / 16:0
	DSPA	18:0 / 18:0
	POPA	16:0 / 18:1 (9)
	PLPA	16:0 / 18:2 (9,12)
	SOPA	18:0 / 18:1 (9)
	SLPA	18:0 / 18:2 (9,12)
	DXPA	16:1 (9) / 16:1 (9)
	YOPA	16:1 (9) / 18:1 (9)
	DOPA	18:1 (9) / 18:1 (9)
	DGPA	20:1 (11) / 20:1 (11)
	DEPA	22:1 (13) / 22:1 (13)
	DNPA	24:1 (15) / 24:1 (15)
PC Lipids (phosphatidylcholine)	DLPC	12:0 / 12:0
	DMPC	14:0 / 14:0
	DPPC	16:0 / 16:0
	DSPC	18:0 / 18:0
	POPC	16:0 / 18:1 (9)
	PLPC	16:0 / 18:2 (9,12)
	SOPC	18:0 / 18:1 (9)
	SLPC	18:0 / 18:2 (9,12)
	DYPC	16:1 (9) / 16:1 (9)
	YOPC	16:1 (9) / 18:1 (9)
	DOPC	18:1 (9) / 18:1 (9)
	DGPC	20:1 (11) / 20:1 (11)
	DEPC	22:1 (13) / 22:1 (13)
	DNPC	24:1 (15) / 24:1 (15)
PE Lipids (phosphatidylethanolamine)	DLPE	12:0 / 12:0
	DMPE	14:0 / 14:0
	DPPE	16:0 / 16:0
	DSPE	18:0 / 18:0
	PYPE	16:0 / 16:1 (9)
	POPE	16:0 / 18:1 (9)
	PLPE	16:0 / 18:2 (9,12)
	SOPE	18:0 / 18:1 (9)
	SLPE	18:0 / 18:2 (9,12)

	DYPE	16:1 (9) / 16:1 (9)
	YOPE	16:1 (9) / 18:1 (9)
	OSPE	18:1 (9) / 16:1 (9)
	DOPE	18:1 (9) / 18:1 (9)
	DGPE	20:1 (11) / 20:1 (11)
	DEPE	22:1 (13) / 22:1 (13)
	DNPE	24:1 (15) / 24:1 (15)
PG Lipids (phosphatidylglycero)	DLPG	12:0 / 12:0
	DMPG	14:0 / 14:0
	DPPG	16:0 / 16:0
	DSPG	18:0 / 18:0
	PSPG	16:0 / 16:1 (9)
	POPG	16:0 / 18:1 (9)
	PLPG	16:0 / 18:2 (9,12)
	SOPG	18:0 / 18:1 (9)
	SLPG	18:0 / 18:2 (9,12)
	DXPG	16:1 (9) / 16:1 (9)
	DOPG	18:1 (9) / 18:1 (9)
	DGPG	20:1 (11) / 20:1 (11)
	DEPG	22:1 (13) / 22:1 (13)
	DNPG	24:1 (15) / 24:1 (15)
PS Lipids (phosphatidylserine)	DLPS	12:0 / 12:0
	DMPS	14:0 / 14:0
	DPPS	16:0 / 16:0
	DSPS	18:0 / 18:0
	POPS	16:0 / 18:1 (9)
	PLPS	16:0 / 18:2 (9,12)
	SOPS	18:0 / 18:1 (9)
	SLPS	18:0 / 18:2 (9,12)
	DXPS	16:1 (9) / 16:1 (9)
	YOPS	16:1 (9) / 18:1 (9)
	DOPS	18:1 (9) / 18:1 (9)
	DGPS	20:1 (11) / 20:1 (11)
	DEPS	22:1 (13) / 22:1 (13)
	DNPS	24:1 (15) / 24:1 (15)
PI Lipids (phosphatidylinositol)	DMPI	14:0 / 14:0
	DMPI13	14:0 / 14:0
	DMPI14	14:0 / 14:0
	DMPI15	14:0 / 14:0
	DMPI24	14:0 / 14:0
	DMPI25	14:0 / 14:0
	DMPI33	14:0 / 14:0
	DMPI34	14:0 / 14:0

	DMPI35	14:0 / 14:0
	PYPI	16:0 / 16:1 (9)
	POPI	16:0 / 18:1 (9)
	POPI13	16:0 / 18:1 (9)
	POPI14	16:0 / 18:1 (9)
	POPI15	16:0 / 18:1 (9)
	POPI24	16:0 / 18:1 (9)
	POPI25	16:0 / 18:1 (9)
	POPI33	16:0 / 18:1 (9)
	POPI34	16:0 / 18:1 (9)
	POPI35	16:0 / 18:1 (9)
	PLPI	16:0 / 18:2 (9,12)
	PLPI13	16:0 / 18:2 (9,12)
	PLPI14	16:0 / 18:2 (9,12)
	PLPI15	16:0 / 18:2 (9,12)
	PLPI24	16:0 / 18:2 (9,12)
	PLPI25	16:0 / 18:2 (9,12)
	PLPI33	16:0 / 18:2 (9,12)
	PLPI34	16:0 / 18:2 (9,12)
	PLPI35	16:0 / 18:2 (9,12)
	PNPI	16:0 / 18:3 (9,12,15)
	PNPI13	16:0 / 18:3 (9,12,15)
	PNPI14	16:0 / 18:3 (9,12,15)
	PNPI15	16:0 / 18:3 (9,12,15)
	PNPI24	16:0 / 18:3 (9,12,15)
	PNPI25	16:0 / 18:3 (9,12,15)
	PNPI33	16:0 / 18:3 (9,12,15)
	PNPI34	16:0 / 18:3 (9,12,15)
	PNPI35	16:0 / 18:3 (9,12,15)
	SAPI	18:0 / 20:4 (5,7,9,11)
	SAPI13	18:0 / 20:4 (5,7,9,11)
	SAPI14	18:0 / 20:4 (5,7,9,11)
	SAPI15	18:0 / 20:4 (5,7,9,11)
	SAPI24	18:0 / 20:4 (5,7,9,11)
	SAPI25	18:0 / 20:4 (5,7,9,11)
	SAPI33	18:0 / 20:4 (5,7,9,11)
	SAPI34	18:0 / 20:4 (5,7,9,11)
	SAPI35	18:0 / 20:4 (5,7,9,11)
CL Lipids (cardiolipin)	TMCL1	14:0, 14:0 / 14:0, 14:0
	TMCL2	14:0, 14:0 / 14:0, 14:0
	PMCL1	16:0 (9cyc10), 16:0 / 16:0, 16:0
	PMCL2	16:0 (9cyc10), 16:0 / 16:0, 16:0
	PVCL2	16:0, 18:1(11) / 16:0, 18:1 (11)

	TXCL1	16:1 (9), 16:1 (9) /16:1 (9), 16:1 (9)
	TXCL2	16:1 (9), 16:1 (9) /16:1 (9), 16:1 (9)
	TOCL1	18:1 (9), 18:1 (9) /18:1 (9), 18:1 (9)
	TOCL2	18:1 (9), 18:1 (9) /18:1 (9), 18:1 (9)
	LOACL1	18:2 (9,12), 18:2 (9,12) / 18:1 (9), 18:2 (9,12)
	LOACL2	18:2 (9,12), 18:2 (9,12) / 18:1 (9), 18:2 (9,12)
	LOCCL1	18:2 (9,12), 18:2 (9,12) / 18:2 (9,12), 18:1 (9)
	LOCCL2	18:2 (9,12), 18:2 (9,12) / 18:2 (9,12), 18:1 (9)
	TLCL1	18:2 (9,12), 18:2 (9,12) / 18:2 (9,12), 18:2 (9,12)
	TLCL2	18:2 (9,12), 18:2 (9,12) / 18:2 (9,12), 18:2 (9,12)
	LNCCL1	18:2 (9,12), 18:2 (9,12) / 18:2 (9,12), 18:3 (9,12,15)
	LNCCL2	18:2 (9,12), 18:2 (9,12) / 18:2 (9,12), 18:3 (9,12,15)
	LNACL1	18:2 (9,12), 18:2 (9,12) / 18:3 (9,12,15), 18:2 (9,12)
	LNACL2	18:2 (9,12), 18:2 (9,12) / 18:3 (9,12,15), 18:2 (9,12)
	LNDCL1	18:2 (9,12), 18:3 (9,12,15) / 18:2 (9,12), 18:2 (9,12)
	LNDCL2	18:2 (9,12), 18:3 (9,12,15) / 18:2 (9,12), 18:2 (9,12)
	LNBL1	18:3 (9,12,15), 18:2 (9,12) / 18:2 (9,12), 18:2 (9,12)
	LNBL2	18:3 (9,12,15), 18:2 (9,12) / 18:2 (9,12), 18:2 (9,12)
PUFA Lipids (polyunsaturated fatty acid)	SAPA	18:0 / 20:4 (5,8,11,14)
	SAPC	18:0 / 20:4 (5,8,11,14)
	SAPE	18:0 / 20:4 (5,8,11,14)
	SAPG	18:0 / 20:4 (5,8,11,14)
	SAPS	18:0 / 20:4 (5,8,11,14)
	SDPA	18:0 / 22:6 (4,7,10,13,16,19)
	SDPC	18:0 / 22:6 (4,7,10,13,16,19)
	SDPE	18:0 / 22:6 (4,7,10,13,16,19)
	SDPG	18:0 / 22:6 (4,7,10,13,16,19)
	SDPS	18:0 / 22:6 (4,7,10,13,16,19)
	DAPA	20:4 (5,8,11,14) / 20:4 (5,8,11,14)
	DAPC	20:4 (5,8,11,14) / 20:4 (5,8,11,14)
	DAPE	20:4 (5,8,11,14) / 20:4 (5,8,11,14)
	DAPG	20:4 (5,8,11,14) / 20:4 (5,8,11,14)
DAPS	20:4 (5,8,11,14) / 20:4 (5,8,11,14)	
SM Lipids (sphingo)	PSM	18:1 / 16:0
	SSM	18:1 / 18:0
	ASM	18:1 / 20:0
	BSM	18:1 / 22:0
	23SM	18:1 / 23:0
	LSM	18:1 / 24:0
	OSM	18:1 / 18:1 (9)
	NSM	18:1 / 24:1 (15)
	CER160	18:1 / 16:0
	CER180	18:1 / 18:0

	CER181	18:1 / 18:1
	CER200	18:1 / 20:0
	CER220	18:1 / 22:0
	CER240	18:1 / 24:0
	CER241	18:1 / 24:1
Bacterial Lipids	QMPE	15:0 / 16:0 (9cyc10)
	PMPE	16:0 / 16:0 (9cyc10)
	PMPG	16:0 / 16:0 (9cyc10)
	PPPE	16:0 / 16:1 (9)
	PVPE	16:0 / 18:1 (11)
	PVPG	16:0 / 18:1 (11)
	APPC	1ME(antiso) 15:0/16:0
	IPPC	1ME(iso) 15:0/16:0
	PHPC	4ME 16:0