

Table S1 J. Janin A minimal model of protein-protein affinity

ΔG_d , iRMSD, ΔASA from Kastiris et al. (2011)					
$\Delta G_{calc} = \alpha + \beta \Delta ASA + \gamma (iRMSD)^2$ for $iRMSD \leq d_{max}$					
$\alpha=6.1 \text{ kcal.mol}^{-1}$, $\beta=3.8 \text{ cal.mol.}\text{\AA}^{-2}$, $\gamma=-1.7 \text{ kcal.mol.}\text{\AA}^{-2}$, $d_{max}=1.5 \text{ \AA}$					
Complex PDB	Class	ΔG_d (kcal/mol)	iRMSD (\AA)	ΔASA (\AA^2)	ΔG_{calc} (kcal/mol)
1A2K_C:AB	O	9.3	1.11	1603	10.1
1ACB_E:I	EI	13.1	1.08	1544	10.0
1AHW_AB:C	A	11.6	0.69	1899	12.5
1AK4_A:D	O	6.4	1.33	1029	7.0
1AKJ_AB:DE	O	5.3	1.14	1995	11.5
1ATN_A:D	O	12.1	3.28	1774	9.0
1AVX_A:B	EI	12.5	0.47	1585	11.8
1AVZ_B:C	NC	6.5	0.73	1259	10.0
1AY7_A:B	NC	13.2	0.54	1237	10.3
1B6C_A:B	O	8.9	1.96	1752	8.9
1BJ1_HL:VW	AB	11.6	0.50	1731	12.3
1BRS_A:D	EI	17.3	0.42	1555	11.7
1BUH_A:B	EI	9.7	0.75	1324	10.2
1BVK_DE:F	A	10.5	1.24	1321	8.5
1BVN_P:T	EI	15.1	0.87	2222	13.3
1CBW_ABC:D	NC	10.7	0.74	1457	10.7
1DE4_AB:CF	O	9.8	2.59	2066	10.1
1DFJ_E:I	EI	18.0	1.02	2582	14.1
1DQJ_AB:C	A	11.7	0.75	1765	11.9
1E4K_AB:C	O	7.9	2.59	1634	8.5
1E6E_A:B	EX	8.3	1.33	2315	11.9
1E6J_HL:P	A	10.3	1.05	1245	9.0
1E96_A:B	O	7.4	0.71	1179	9.7
1EAW_A:B	EI	14.1	0.54	1866	12.7
1EEX_A:BC	O	15.6	2.44	3347	15.0
1EFN_B:A	O	10.1	0.90	1253	9.5
1EMV_A:B	EI	18.6	1.28	1535	9.2
1EWY_A:C	EX	7.4	0.80	1502	10.7
1EZU_C:AB	EI	13.8	1.21	2751	14.1
1F34_A:B	EI	14.2	0.93	3038	16.2
1F6M_A:C	EX	7.6	4.90	1830	9.2
1FC2_C:D	O	10.4	1.69	1307	7.2
1FFW_A:B	O	8.1	1.43	1170	7.1
1FLE_E:I	EI	12.3	1.02	1771	11.1
1FQJ_A:B	O	9.8	0.91	1806	11.6
1FSK_BC:A	AB	13.1	0.45	1623	11.9
1GCQ_B:C	O	6.5	0.92	1208	9.3
1GL1_A:I	EI	13.2	1.20	1595	9.7
1GLA_G:F	EX	6.8	0.98	1304	9.4
1GPW_A:B	O	11.3	0.65	2097	13.4
1GRN_A:B	O	9.0	1.22	2332	12.4
1GXD_A:C	EI	11.7	1.39	2445	12.1
1H1V_A:G	O	10.2	1.05	2071	12.1
1H9D_A:B	O	9.2	1.32	2125	11.2
1HCF_AB:X	O	13.1	0.88	2146	12.9

1HE8_B:A	O	7.4	0.92	1305	9.6
1HIA_AB:I	EI	10.8	1.40	1737	9.4
1I2M_A:B	O	15.8	2.12	2779	12.8
1I4D_D:AB	O	7.5	1.41	1657	9.0
1I81_AB:E	O	9.8	2.09	2808	12.9
1IBR_A:B	O	12.1	2.54	3370	15.1
1IJK_A:BC	EX	10.4	0.68	1648	11.6
1IQD_AB:C	AB	15.0	0.48	1976	13.2
1J2J_A:B	O	8.1	0.63	1209	10.0
1JIW_P:I	EI	15.5	2.07	2018	9.9
1JMO_A:HL	EX	9.5	3.21	3461	15.4
1JPS_HL:T	A	13.6	0.51	1852	12.7
1JTG_B:A	EI	12.8	0.49	2600	15.6
1JWH_CD:A	EX	11.1	1.27	1451	8.9
1K5D_AB:C	O	12.8	1.19	2527	13.3
1KAC_A:B	O	10.7	0.95	1456	10.1
1KKL_ABC:H	EX	10.0	2.20	1641	8.5
1KLU_AB:D	O	7.3	0.43	1254	10.6
1KTZ_A:B	O	8.9	0.39	989	9.6
1KXP_A:D	O	12.3	1.12	3341	16.7
1KXQ_H:A	AB	11.5	0.72	2172	13.5
1LFD_B:A	O	7.8	1.79	1167	6.7
1M10_A:B	EX	11.2	2.10	2097	10.2
1MAH_A:F	EI	14.5	0.61	2145	13.6
1MLC_AB:E	NC	9.6	0.60	1392	10.8
1MQ8_A:B	O	7.5	1.76	1241	7.0
1NB5_AP:I	EI	13.9	1.58	1802	9.1
1NCA_HL:N	AB	11.0	0.24	1953	13.4
1NSN_HL:S	AB	16.0	0.35	1776	12.6
1NVU_Q:S	O	7.4	1.98	3127	14.2
1NVU_R:S	O	7.8	3.09	3452	15.4
1NW9_B:A	EX	9.3	1.97	2112	10.3
1OC0_A:B	EX	12.3	1.00	1313	9.4
1OPH_A:B	EI	11.3	1.20	1360	8.8
1P2C_AB:C	A	13.6	0.46	1456	11.3
1PPE_E:I	EI	15.6	0.34	1688	12.3
1PVH_A:B	O	9.5	0.34	1403	11.2
1PXV_A:C	EI	13.0	2.63	2336	11.2
1QA9_A:B	O	7.2	0.73	1353	10.3
1R0R_E:I	EI	14.2	0.45	1409	11.1
1R6Q_A:C	EX	8.8	1.67	2450	11.6
1RLB_ABCD:E	O	8.2	0.66	1439	10.8
1RV6_VW:X	O	13.9	1.09	1639	10.3
1S1Q_A:B	O	4.3	0.98	1288	9.4
1T6B_X:Y	O	13.1	0.62	1948	12.9
1US7_A:B	EX	8.1	1.06	1106	8.4
1UUG_A:B	EI	19.0	0.77	2121	13.2
1VFB_AB:C	A	11.5	1.02	1383	9.6
1WDW_BD:A	EX	12.7	1.29	3159	15.3
1WEJ_HL:F	A	12.5	0.31	1177	10.4
1WQ1_R:G *	O	6.6	1.16	2913	14.9
1XD3_A:B	O	8.9	1.24	2281	12.2
1XQS_A:C	O	7.1	1.77	2350	11.2

1XU1_ABD:T	O	11.2	1.30	1700	9.7
1YVB_A:I	EI	11.2	0.51	1743	12.3
1Z0K_A:B	O	7.0	0.53	1787	12.4
1ZHI_A:B	O	9.1	0.68	1322	10.3
1ZLI_A:B	EI	12.0	2.53	2087	10.2
1ZM4_A:B	EX	8.0	2.94	1554	8.2
2A9K_A:B	EX	10.2	0.85	1751	11.5
2ABZ_B:E	EI	11.7	0.90	1447	10.2
2AJF_A:E	O	10.6	0.65	1704	11.9
2AQ3_A:B	NC	6.7	1.82	1105	6.5
2B42_A:B	EI	12.1	0.72	2520	14.8
2B4J_AB:C	O	10.9	0.99	1259	9.2
2BTF_A:P	O	7.7	0.75	2063	13.0
2COL_A:B	O	9.8	2.62	2013	9.9
2FJU_B:A	O	7.2	1.04	1245	9.0
2GO_A:B	O	12.1	0.60	1631	11.7
2HLE_A:B	O	10.1	1.40	2116	10.8
2HQS_A:H	O	10.2	1.14	2333	12.8
2HRK_A:B	O	11.0	2.03	1595	8.3
2I25_N:L	A	12.3	1.21	1425	9.0
2I9B_E:A	O	12.9	3.79	2382	11.3
2J0T_A:D	EI	13.3	1.23	1471	9.1
2JEL_HL:P	AB	11.6	0.17	1501	11.8
2MTA_HL:A	EX	7.4	0.41	1461	11.4
2NYZ_AB:D	O	12.7	2.09	2160	10.5
2O3B_A:B	EI	15.7	3.13	1684	8.7
2O0B_A:B	EX	5.7	0.85	808	7.9
2OO_AB:C	EX	10.7	1.42	2065	10.5
2OUL_A:B	EI	12.0	0.53	1933	13.0
2OZA_B:A	O	11.7	1.89	6254	26.1
2PCB_A:B	NC	6.8	0.45	1029	9.7
2PCC_A:B	EX	7.9	0.39	1141	10.2
2PTC_E:I	EI	18.0	0.28	1429	11.4
2SIC_E:I	EI	13.8	0.36	1617	12.0
2SNI_E:I	EI	16.0	0.35	1628	12.1
2TGP_Z:I	NC	7.5	0.57	1432	11.0
2UUY_A:B	EI	11.3	0.44	1280	10.6
2VDB_A:B	O	13.4	0.47	1807	12.6
2VIR_AB:C	A	12.3	0.80	1263	9.8
2VIS_AB:C	NC	7.4	0.80	1296	9.9
2WPT_A:B	NC	10.7	1.61	1581	8.3
3BP8_AB:C	O	11.4	0.45	1398	11.1
3BZD_A:B	O	9.6	1.08	1312	9.1
3CPH_G:A	O	8.8	2.12	1685	8.7
3SGB_E:I	EI	14.5	0.36	1268	10.7
4CPA_A:I	EI	11.3	1.52	1177	6.8