

Fig. S3. Structure based sequence alignment of OafB, OafA and closest structural homologues. Residues conserved in >50% highlighted blue, catalytic and oxyanion hole residues are indicated by an arrow. Abbreviations and details of sequences used in methods section.

<i>OafB-S.PA</i>	334	.EKPLRNSRSKYIT AILL . TLSVFGTGLIGAFIFHINGVKDR	373
<i>OafB-S.Tym</i>	334	.EKPLRHSRKKISIT TIIL . AVVVFGSGIFGIVTYSMNGIKER	373
<i>OafA-S.Tym</i>	325	.ENTLRKRVK LQFN . IVLFSSTLALCLFVMFTKGVSR	360
<i>OafA-H.inf</i>	345	.EQPIRKS KLNFK . QSFLYIYFIPSLLLLGF	373
<i>OatA-S.pne</i>	347	. . EPWIAGKNTPIVQTLRPLPYIH . AILAAGTGILTIIVCTVTLLAPQ	391
<i>OatA-S.aur</i>	357	.ETPIRKKGFKAFAFLPKKKQGFARTVLLVILLVPSIVVLSGQFDALGKQHEAEK	410
<i>Ape1-N.men</i>	1	GSLPVASVSLDVTV . . SPSAPYT DTNGLLTD	30
<i>TAP1-E.col</i>	1 MMNFN . NVFRWHLPLFLVLLT	21
<i>RGAE-A.acu</i>	1	-1
<i>5B5S-T.cel</i>	1	-1
<i>2VPT-C.the</i>	1	-1
<i>OafB-S.PA</i>	374 EINKSAGEYASVTDVY . NYKYGELLRGGICHSVQ . . LTAAISNGCIKN	419
<i>OafB-S.Tym</i>	374 SVNKSAGEYASVTNVY . DYYKYGELLRGGICHSVL . LKDAISNGCIKN	419
<i>OafA-S.Tym</i>	361 FSDTLKQ . VVEYRMDN SPWRPDICFLNPDQDYSAFSKQDKM	401
<i>OafA-H.inf</i>	374 NLYKRQ . TIRAEKEHIEQSI PVSNEH	399
<i>OatA-S.pne</i>	392 VGAFETDLTVNGLKQAATNIGQTK VMAERADANSLG	427
<i>OatA-S.aur</i>	411	KEKKTEFKTTKKK . VVKDKQEDKQTA NSKEDI	442
<i>Ape1-N.men</i>	31 YGNASASPMKKLQSV AQ GSG	51
<i>TAP1-E.col</i>	22	25
<i>RGAE-A.acu</i>	1	-1
<i>5B5S-T.cel</i>	1	-1
<i>2VPT-C.the</i>	1	1
<i>OafB-S.PA</i>	420	GKHN FIIGDSY AAA LFNG LSH . YIDNK CS D	449
<i>OafB-S.Tym</i>	420	SRNN FIIGDSY AAA LYNGL SS . YIKNNNEK	449
<i>OafA-S.Tym</i>	402	TEKSFVVW GDSH AAH LMPGL KSV FGNS	428
<i>OafA-H.inf</i>	400	YPAKVIIL GDSH SSH LEAF LN YVG NKE GWK	429
<i>OatA-S.pne</i>	428	IADGTML IGDSV ALRANT ALQTAL	451
<i>OatA-S.aur</i>	443	KKSSPLL IGDSV MVD IGVNFTKKI	466
<i>Ape1-N.men</i>	52	ETFR LQIGDS HTAGDF FTDSL RKRLQKTW CD GGIGWVYPANVKGQRM	99
<i>TAP1-E.col</i>	26	AADTLLIL GDSLS AGYRMSA . SAAWPAL LN DKW QSK	60
<i>RGAE-A.acu</i>	1	. . TTVYLAG DSTM AKNGGGSGTNGWGEY LS YLS	32
<i>5B5S-T.cel</i>	1	. MVKV MLL GDS ITEITC WRPLVW . EQITSA CL AG	32
<i>2VPT-C.the</i>	2	TIIK IMPV GDS CTEGMGGGE . MGSYRTE LY RRLLTQA CL S	40
<i>OafB-S.PA</i>	450 YIIS	453
<i>OafB-S.Tym</i>	450 YVIS	453
<i>OafA-S.Tym</i>	429 LNIT	432
<i>OafA-H.inf</i>	430 ADIF	433
<i>OatA-S.pne</i>	452 PGAQ	455
<i>OatA-S.aur</i>	467 PNAQ	470
<i>Ape1-N.men</i>	100	AAVRHNGNWQSLTSRNN TGDFPLGGILAHTGSGGSM TLTASDGIASKQRVSLFAK	154
<i>TAP1-E.col</i>	61 TSVV	64
<i>RGAE-A.acu</i>	33 ATV	35
<i>5B5S-T.cel</i>	33 SVDFVG . SMNDLQPNCSR P	50
<i>2VPT-C.the</i>	41 IDFVGSSQRRSGP . SSS	56

<i>OafB-S.PA</i>	454	453
<i>OafB-S.Tym</i>	454	453
<i>OafA-S.Tym</i>	433	432
<i>OafA-H.inf</i>	434	433
<i>OatA-S.pne</i>	456	455
<i>OatA-S.aur</i>	471	470
<i>Ape1-N.men</i>	155	PLLAEQTLTVNGNTVSANGGGWQVLDTGAALPLTIHTEMPWDIGFINIENPAGGI	209
<i>TAP1-E.col</i>	65	64
<i>RGAE-A.acu</i>	36	35
<i>5B5S-T.cel</i>	51	53
<i>2VPT-C.the</i>	57	58

<i>OafB-S.PA</i>	454	... QMTD GNAPPLFVDGKDDLQRSVITLNN . . . NRINETKRV . . QPEVVL	495
<i>OafB-S.Tym</i>	454	... QMTD GNAPPLFVSGKDDLQRDVGSINA . . . DRIKEIGIV . . KPEIVL	495
<i>OafA-S.Tym</i>	433	... QRTASLCPPIIGLQKDRPYC KDIND . . . MVAKEISDN . . KPTTVL	473
<i>OafA-H.inf</i>	434	... KDKFECSFIVN . EQYQLDPNC QSVWQ . . . KDSQYKAIF . . ISAFYD	473
<i>OatA-S.pne</i>	456	... INAQ VS VTT KTAIE . . . IMLNNSQNKF . LPKTVV	485
<i>OatA-S.aur</i>	471	... IDGK VG RQL VDATP . . . IVKSQYKDYAKKGQKVV	501
<i>Ape1-N.men</i>	210	TVSAMGI NG AQL TQWSKWRADRMNDLAQT . . GADLVI	244
<i>TAP1-E.col</i>	65	... NASI SG DTS QQGLA . . . RLPALLKQH . . QPRWVL	93
<i>RGAE-A.acu</i>	36	... VNDAV AG RSA RSYTR . . EGRFENTADVVTAGDYVI	68
<i>5B5S-T.cel</i>	54	DPDHEGH SG WQA YDIAR . . NNIAGWVQNT . . KPDIIVQ	86
<i>2VPT-C.the</i>	59	DKDHEGH SG WTI PQIAS . . . NINVWLNTH . . NPDVVF	90

<i>OafB-S.PA</i>	496	L TWSV . . RGTNG . . . VHDKK LAT DALSLTIKK	522
<i>OafB-S.Tym</i>	496	L TWSV . . RGSNG . . . VHDKK LAT EALSLTIKE	522
<i>OafA-S.Tym</i>	474	MSALWPVY PMR DYLPETIKF	493
<i>OafA-H.inf</i>	474	LRMCGQPVPFRFRPETFIEP DFK ARFKNTVKQ	504
<i>OatA-S.pne</i>	486	IATGVNPE NYK DDWDSIVKN	506
<i>OatA-S.aur</i>	502	VELGTNGAFTK DQLNELLS	521
<i>Ape1-N.men</i>	245	LSYCTNEAFNNID IADTE QKWLDTVRQ	272
<i>TAP1-E.col</i>	94	VELGNDGLRG FQPQ QTE QTLRQILQD	120
<i>RGAE-A.acu</i>	69	VEFGHNDGGSLS . . . TDNGRTDCSGTGAEVCYSVYDGVNETILTFPAYLENAAKL	120
<i>5B5S-T.cel</i>	87	FMLGTNDVNIGH . . . RNAD SII GSYTIMLNA	114
<i>2VPT-C.the</i>	91	LWIGNDLLNG NLLNA TGLSNLIDQ	116

<i>OafB-S.PA</i>	523	IK EAS PDSR IIFIGPVPE WNANLVKIIISNYLSEFKKTPPLYMTY	566
<i>OafB-S.Tym</i>	523	IK KVS PQSRL IIVGPPVE WNANLVKVISNYTSEFKKTPPIYMSY	566
<i>OafA-S.Tym</i>	494	LKDNKV . KN IIVGPPVW KKT MIDTIEDMGINSGRTPVWSM . T	535
<i>OafA-H.inf</i>	505	LAMQK . . . PYYVFANSSVSR SPL RGYLLENYGLEKYLTPI . . .	542
<i>OatA-S.pne</i>	507	LP . . . KGHM IIVTP . YEG DKT	525
<i>OatA-S.aur</i>	522	FGK . . . ADTYLVSIRVPR	536
<i>Ape1-N.men</i>	273	TRDSLPAAGLII GAPESLKN TLGVCGRPV	303
<i>TAP1-E.col</i>	121	VKAAN . . AEPLMQIRLPANY GRR	142
<i>RGAE-A.acu</i>	121	FTAKG . . AKVILSSQTPNNPW ETGTFVN	146
<i>5B5S-T.cel</i>	115	MRAANPRVKVIVDKIIP TSW S	135
<i>2VPT-C.the</i>	117	IFTVKPNVTLFVADYYPWPE	136

<i>OafB-S.PA</i>	567	GLNSEISEWDSYFSNVPKMG I E Y I S A Y . K A L C N E S G C . . L T R V G N G P D F	613
<i>OafB-S.Tym</i>	567	GLNDEIKGWDKFFEENVPKLG A E Y I S A Y . S A L C N E S G C . . L T R V G D G P D F	613
<i>OafA-S.Tym</i>	536	DETRNLRDNDKYLRELAKHEH S L T Y I S P L . E T M C T . E S Y C K A I I G N R I A Y P	583
<i>OafA-H.inf</i>	543	HRMGDIDASNKIIHDLVKDIP N V Y W V D A Q . Q Y L P K D S V M A E G K Y	585
<i>OatA-S.pne</i>	526	ETYAIVEKAAA Y M R E L A E . K T P Y I T I A D W N . Q V A K E H P E I	563
<i>OatA-S.aur</i>	536 D Y E G R I N K L I Y E A A E K R S N V H L V D W Y . K A S A G H P E Y	571
<i>Ape1-N.men</i>	304 R L T E V Q Q M Q R R V A R Q G Q T M F W S W Q . . N A M G G I C S M K . . N W L N Q G W	344
<i>TAP1-E.col</i>	143 Y N E A F S A I Y P K L A K E F D V P L L P F F M E E V Y L K P Q W	176
<i>RGAE-A.acu</i>	147 S P T R F V E Y A E L A A E V A G V E Y V D H W . . S Y V D S I Y E T L . . G N A T V N S Y	188
<i>5B5S-T.cel</i>	136 D A T I E A V N T A I P G W V Q Q T T A E S P V V I A D C S . R A A G F T N D M	175
<i>2VPT-C.the</i>	137 A I K Q Y N A V I P G I V Q Q K A N A G K K V Y F V K L S . . E I Q F D R N T D	174

<i>OafB-S.PA</i>	614	I T A V D W G H L T K P C S D F L F N K I G N K I I K	640
<i>OafB-S.Tym</i>	614	V T A V D W G H L T K P C S D F L M K K I G H L I I R	640
<i>OafA-S.Tym</i>	584	I . Q Y D N A H L T P E C S G W F I E E V K K Q I S K	609
<i>OafA-H.inf</i>	586	L . Y G D Q D H L T N F G A Y Y M A K E F S K Y Q R V M T P E Q V K K L Y E	622
<i>OatA-S.pne</i>	564	W A G T D Q V H F G S E S S T I E A G A K L Y A D T I A T A L Q T A Q D K P V K	603
<i>OatA-S.aur</i>	572	F . A Y D G I H L E Y A G S K A L T D L I V K T M E T H A T N K K .	603
<i>Ape1-N.men</i>	345	A . A K D G V H F S A K G Y R R A A E M L A D S L E E L V R S A A I	377
<i>TAP1-E.col</i>	177	M . Q D D G I H P N R D A Q P F I A D W M A K Q L Q P L V N H D S .	208
<i>RGAE-A.acu</i>	189	F . P I D H T H T S P A C A E V V A E A F L K A V V C T G T S L K S V L T T T S F	228
<i>5B5S-T.cel</i>	176	L . R D D G V H P N S K G D Q F I A G Q I G P K L I Q L I K D V S .	207
<i>2VPT-C.the</i>	175	I . S W D G L H L S E I G Y K K I A N I W Y K Y T I D I L R R A L A	207

<i>OafB-S.PA</i>	641	640
<i>OafB-S.Tym</i>	641	640
<i>OafA-S.Tym</i>	610	609
<i>OafA-H.inf</i>	623	622
<i>OatA-S.pne</i>	604	SK . . .	605
<i>OatA-S.aur</i>	604	603
<i>Ape1-N.men</i>	378	R	378
<i>TAP1-E.col</i>	209	208
<i>RGAE-A.acu</i>	229	EGTCL	233
<i>5B5S-T.cel</i>	208	207
<i>2VPT-C.the</i>	208	G	208